

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS**

**FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:  
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E CONTROLE  
DE REATORES CATALÍTICOS DE LEITO FIXO**

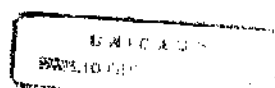
**AUTOR: EDUARDO COSELLI VASCO DE TOLEDO**

**ORIENTADOR: PROF. DR. RUBENS MACIEL FILHO**

**TESE DE DOUTORADO APRESENTADA À FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA  
COMO PARTE DOS REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE  
DOUTOR EM ENGENHARIA QUÍMICA.**

**CAMPINAS - SÃO PAULO**

**FEVEREIRO DE 1999**



UNIDADE BC  
 N.º CHAMADA:  
7875m  
 V. Ex  
 TOMBO BC/ 39919  
 PROC. 2781.00  
 C ☐ ☒ X  
 PREÇO R\$ 11,00  
 DATA 12/02/00  
 N.º QPD

CM-00137836-6

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
 BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

V441m

Vasco de Toledo, Eduardo Coselli

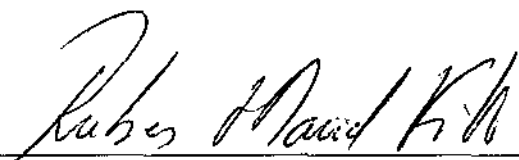
Modelagem, simulação e controle de reatores catalíticos de leito  
 fixo / Eduardo Coselli Vasco de Toledo.--Campinas, SP: [s.n.], 1999.

Orientador: Rubens Maciel Filho.

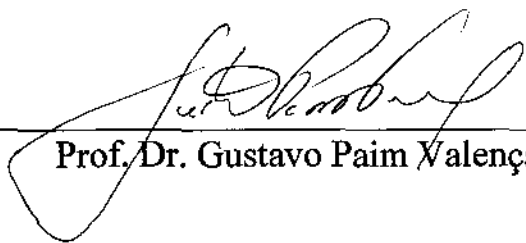
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade  
 de Engenharia Química.

1. Simulação (Computadores). 2. Controle de processos químicos.  
 3. Reatores químicos. I. Maciel Filho, Rubens. II. Universidade  
 Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

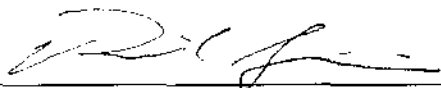
Tese de Doutorado defendida e aprovada em 26 de Fevereiro de 1999  
pela banca examinadora constituída pelos professores:



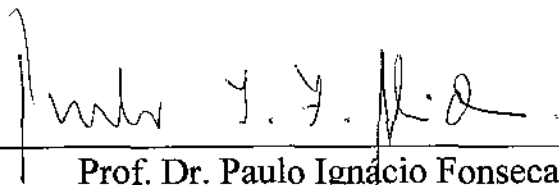
Prof. Dr. Rubens Maciel Filho



Prof. Dr. Gustavo Paim Valença



Prof. Dr. Reinaldo Giudici

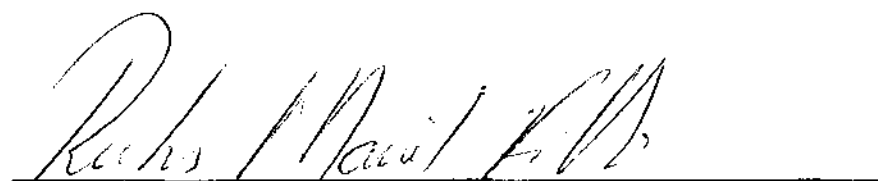


Prof. Dr. Paulo Ignácio Fonseca de Almeida



Prof. Dr. Silvio Roberto Andrietta

Esta versão corresponde à redação final da Tese de Doutorado em Engenharia Química defendida pelo Eng. Eduardo Coselli Vasco de Toledo e aprovada pela Comissão Julgadora em 26/02/99.

A handwritten signature in cursive script, reading "Rubens Maciel Filho", written over a horizontal line.

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Orientador

“Que não seja eterno posto que é chama, mas que seja infinito enquanto dure.”  
**Vinícius de Moraes**

“Quem ensina, quem é professor, não tem ódio.”

**Milton Santos**

“Educadores, onde estarão? Em que covas terão se escondido? Professores, há aos milhares. Mas o professor é profissão, não é algo que se define por dentro, por amor. Educador, ao contrário, não é profissão, é vocação. E toda vocação nasce de um grande amor, de uma grande esperança.”

“Diz-nos Freud que a questão decisiva não é a compreensão intelectual, mas um ato de amor. São os atos de amor e paixão que se encontram nos momentos fundadores de mundos, momentos em que se encontram os revolucionários, os poetas, os profetas, os videntes.”

“Ah! Como a paixão é doce. Somente os apaixonados sabem viver e morrer. Somente os apaixonados, como D. Quixote, vislumbram batalhas e se entregam a elas. A paixão é o segredo do sentido da vida. E que outra questão mais importante poderá haver? Dizia Camus que o único problema filosófico realmente sério é *julgar se a vida é digna ou não de ser vivida*. E ele comenta que, face a tal questão, todos os problemas fácticos, científicos, perdem o seu sentido.”

“Eu me atrevo a dizer que o fantasma que nos assusta e que nos causa pesadelos mesmo antes de adormecer, o fantasma que nos faz contar, apressados, os anos que ainda nos faltam para a aposentadoria, é a absoluta falta de amor e paixão, o absoluto enfado das rotinas da vida do professor.”

E o que é um professor, na ordem das coisas?

Talvez que um professor seja um funcionário das instituições que gerenciam lagoas e charcos, especialistas em reprodução, peça num aparelho ideológico de Estado. Um educador, ao contrário, é um fundador de mundos, mediador de esperanças, pastor de projetos.”

“Quem não se torna discípulo da Morte está condenado a ser tolo a vida inteira.”

**Rubem Alves**

**“A tarefa da escola numa democracia é salvar a criança de sua família, de sua classe social, de seu país e de sua época histórica. A tarefa da escola, numa democracia, é reconhecer na criança um pequeno profeta, e armar a criança com os instrumentos da profecia. Isso é tarefa da escola, isso é tarefa da universidade. Uma tarefa impossível. Uma missão desmedida. E é necessário ter essa missão, porque é o ideal regulador que estabelece o programa.”**

**Roberto Mangabeira Unger**

**“Deve-se aprender a viver por toda a vida e, por mais que tu talvez te espantes, a vida toda é um aprender a morrer.”**

**Sêneca**

**“A vida não constitui um problema a resolver, mas um mistério a ser vivido.”**

**“Descubra qual a verdadeira paixão de sua vida e siga-a. Trilhe o caminho que não existe. Siga a sua felicidade.”**

**“Dizem que o que todos procuramos é um sentido para a vida. Não penso que seja assim. Penso que o que estamos procurando é uma experiência de estar vivo, de modo que nossas experiências de vida, no plano puramente físico, tenham ressonância no interior do nosso ser e da nossa realidade mais íntima, de modo que realmente sintamos o enlevo de estar vivo.”**

**“A vida vive de matar e comer a si mesma, rejeitando a morte e renascendo”.**

**Joseph Campbell**

**“O amor do cachorro é a coisa mais próxima de Deus.”**

**Carlos Heitor Cony**

**“Religião;  
o solene desvelar dos segredos ocultos do homem,  
a revelação dos seus pensamentos mais íntimos,  
a confissão pública dos seus segredos de amor.”**

**Ludwig Feuerbach**

**“Choramos ao nascer porque chegamos a este imenso cenário de dementes.”**

**“Os miseráveis não têm outro remédio a não ser a esperança.”**

**William Shakespeare**

“É na medida em que me separo do mundo que tenho medo da morte.”

“Ser puro é encontrar esta pátria da alma na qual se torna sensível o parentesco com o mundo, onde as pulsações de sangue se juntam às pulsações violentas do sol das duas horas.”

“Gosto desta vida com abandono e dela quero falar com liberdade: ela me dá orgulho de minha condição de homem.”

“Uma vida com gosto de pedra quente, cheia dos suspiros do mar e das cigarras que começam a cantar.”

“Fora do sol, dos beijos e dos perfumes selvagens, tudo nos parece fútil.”

“Pois se há um pecado contra a vida, ele não é o desespero, mas a esperança de uma outra vida, furtando-se à implacável grandeza desta.”

“Da caixa de Pandora onde se agitaram todos os males da humanidade, os gregos fizeram sair a esperança por último, como o mais terrível de todos.”

“Procurar o que é verdadeiro não é procurar o que é desejável.”

“Sem esperanças, sem verdades absolutas, sem Deus, o homem é livre.”

**Albert Camus**

“O único pensamento que sobrevive é aquele que se mantém na temperatura de sua própria destruição.”

**Edgar Morin**

“A existência não é dada ao homem como um caminho bem arranjado no fim do qual está a morte; mas a morte, como possibilidade, atravessa sua existência e a qualquer momento pode surpreendê-lo.”

“Desde o seu nascimento, o homem já é suficientemente velho para morrer.”

**Heidegger**

“A mentira tem que ser repetida, afirmada e reafirmada monotonamente, para que se firme. Basta que se eleve uma voz para contrariá-la, perderá todo o seu valor. A mentira tem que ser solitária. Tem que ser totalitária. E o totalitário é mentiroso.”

“A afirmação individual pelo prazer supõe o outro, mas um outro que é objeto, coisificado. O outro é a condição para que se obtenha gozo, pouco importando o seu prazer, já que a lei é a do indivíduo.

**Eduardo Guimarães**

“O amante ama o corpo como se fosse a alma e a alma como se fosse o corpo, o amante troca o céu pela terra. O AMOR é a grande subversão.”

**Otávio Paz**

“Jesus disse: Se a carne foi criada por causa do espírito, isto é uma maravilha, mas se o espírito foi criado por causa do corpo, isto é maravilha das maravilhas. No entanto, maravilha-me como essa grande riqueza veio a estar nesta pobreza.”

**O Evangelho de Tomé**

“Diga a verdade e saia correndo.”

**Provérbio Iugoslavo**

“A verdade é a melhor camuflagem. Ninguém acredita nela.”

**Max Frisch**

“Estude as frases que parecem certas e coloque-as em dúvida.”

**David Riesman**

“A maioria das pessoas teme a morte por não terem feito algo de suas vidas.”

**Peter Ustinov**

“A morte só existe para aquele que deseja continuidade. Mas o homem que morre a cada minuto para tudo, para todos os prazeres, todas as dores, todos os hábitos, bons e maus, esse homem conhecerá, por si próprio, o que existe além da morte, o que existe além das agonias desta vida. Além, existe algo, não porque o digo. Cabe-lhes descobrir isso por si mesmos. Mas, para descobrirem, não deve haver sofrimento, porque onde mora o sofrimento, aí não mora o amor.”

“Embora todo mundo diga que há muitos caminhos para a Verdade, não há caminho algum. Só a mente livre, que está só, a mente não corrompida e não influenciada, é só a essa mente que a Verdade se manifesta. Essa mente, com efeito, é uma mente sem medo”

**Krishnamurti**



“Virá o dia em que a matança de um animal será considerada crime tanto quanto o assassinato de um homem.”

**Leonardo da Vinci**

“A História inteira constitui, com efeito, a refutação experimental da assim chamada ‘ordenação ética do universo’.”

**Friedrich Nietzsche**

“O homem sensato se adapta ao mundo. O insensato insiste em adaptar o mundo a ele. Todo o progresso depende, portanto, do homem insensato.”

**Bernard Shaw**

“O amor não envelhece, morre menino.”

**Provérbio Árabe**

## O JEJUM DO CORAÇÃO

**Chuang Tzu**

Yen Hui, o discípulo favorito de Confúcio, veio despedir-se de seu Mestre.

— “Aonde você vai?”, perguntou Confúcio.

— “Vou para Wei.”

— “Para quê?”

— “Ouvi falar que o príncipe de Wei é uma pessoa luxuriosa, com sangue quente nas veias e muito autoritário. Não dá a menor importância a seu povo e recusa-se a ver qualquer falha em si mesmo. Não dá a menor atenção ao fato de que seus súditos estão morrendo, a torto e a direito. Cadáveres jazem por todo o país, como feno no campo. O povo está desesperado. Mas ouvi o senhor dizer, Mestre, que devemos abandonar o estado que está bem governado, e ir para o que está em anarquia. No consultório do médico há muitos doentes. Quero aproveitar esta oportunidade para pôr em prática o que aprendi com o senhor, e ver se posso melhorar as condições de lá.”

— “Quem dera que pudesse”, disse-lhe Confúcio, “você não imagina o que está fazendo. Você trará a ruína à sua própria pessoa. O Tao não necessita de anseios, e você apenas desperdiçará as suas energias em seus esforços malbaratados. Desperdiçando energias, você ficará confuso e ansioso. Com isto, você não será mais capaz de ajudar-se a si mesmo. Os sábios antigos procuravam o Tao, primeiro dentro de si mesmos, depois olhavam para ver se existia algo nos outros que correspondesse ao Tao que eles concebiam. Mas, se você não possuir o Tao dentro de si, de que valerá gastar o seu tempo em vãos esforços a fim de proporcionar aos políticos corruptos uma plataforma correta?... Contudo, acredito que você deva ter uma certa base para esperar obter sucesso. Como acha que poderá levar avante o seu plano?”

Yen Hui respondeu: “Tenciono apresentar-me como um homem humilde, desinteressado, que procura apenas fazer coisas certas, e nada mais: uma maneira inteiramente simples e honesta. Será que com isso ganharei a confiança do senhor?”

— “Certamente que não”, respondeu-lhe Confúcio. “Este homem está convencido de que só ele é que tem razão. Pode pretender, exteriormente, interessar-se por um plano objetivo de justiça, mas não se engane com sua aparência exterior. Ele não está habituado a ter nenhum adversário. O seu ponto de vista é o de assegurar-se de que está certo, esmagando as outras pessoas. Se ele faz isso com os medíocres, certamente o fará com um homem que se lhe apresenta como uma ameaça de ser alguém de altas qualidades. Ele

se apegará teimosamente ao seu modo de pensar. Pode pretender estar interessado em sua conversa a respeito do que seja objetivamente certo, mas, por dentro, não lhe estará dando ouvidos, e nenhuma alteração haverá. E, com isso, você não estará realizando nada.”

Aí, disse-lhe Yen Hui: “Muito bem. Em vez, então, de ir-me diretamente em oposição a ele, mantereí os meus próprios modos de pensar, mas, exteriormente, farei como se fosse ceder. Apelarei para a autoridade da tradição e para os exemplos do passado. Todo aquele que não for comprometido interiormente é um filho do céu, tanto quanto qualquer governante. Não confiarei em nenhum ensinamento meu, e, por conseguinte, não me preocuparei se tenho ou não razão. Serei também reconhecido como muito desinteressado e sincero. Todos irão apreciar minha candura e, assim, serei um instrumento do céu no seu meio.

Desta maneira submetendo-se à obediência ao Príncipe, como fazem os outros homens, curvando-me, ajoelhando-me, prostrando-me como faria um criado, serei aceito, sem nenhuma queixa. Depois disso, outros confiarão em mim e, pouco a pouco, me utilizarão, vendo que meu desejo é apenas o de me tornar útil e trabalhar para o bem-estar de todos. Assim, servirei como um instrumento dos homens.

Enquanto isso, tudo o que tiver de dizer será expresso de acordo com a antiga tradição. Estarei trabalhando com a tradição sagrada dos antigos sábios. Embora o que eu tenha a dizer seja objetivamente uma condenação da conduta do Príncipe, não serei eu, e sim a própria tradição que estará falando por mim. Desta maneira, serei extremamente honesto e não ofenderei a ninguém. Desse modo, também, serei um instrumento da tradição. O senhor não acha que este meu modo de encarar a questão é que está certo?”

— “Evidentemente que não”, disse-lhe Confúcio. “Você tem vários planos diferentes de ação, quando você ainda nem conhece o Príncipe, nem observou o seu caráter! Na melhor das hipóteses, você poderá fugir e salvar a sua pele, mas ainda assim não estará mudando nada do que encontrou. Ele poderá, superficialmente, conformar-se com as suas palavras, mas não haverá nenhuma mudança radical em seu coração.”

Disse-lhe então Yen Hui: “Bem, isto é a minha melhor colaboração à questão. Gostaria que me dissesse, Mestre, o que o senhor me aconselharia.”

— “Você tem de jejuar!”, disse-lhe Confúcio. “Sabe o que quero dizer com essa palavra, jejuar? Não é fácil. Mas os caminhos fáceis não vêm de Deus.”

“Ah”, disse Yen Hui, “eu já me acostumei a jejuar! Em casa, éramos pobres. Passávamos meses sem vinho nem carne. Isso é que é jejum, não?”

“Bem, você poderá chamar a isso de observar o jejum, se quiser”, disse-lhe Confúcio, “mas não é o jejum do coração.”

“Diga-me”, retrucou-lhe Yen Hui, “o que se entende por jejum do coração?”

Respondeu-lhe Confúcio: “O objetivo do jejum é a unidade interior. Isto significa ouvir, mas não com os ouvidos; ouvir, mas não com o entendimento; ouvir com o espírito, com todo o seu ser. Ouvir apenas com os seus ouvidos é uma coisa. Ouvir com o entendimento é outra. Mas ouvir com o espírito não se limita a qualquer faculdade, aos ouvidos ou à mente. Daí exigir o esvaziamento de todas as faculdades. E quando as faculdades ficam vazias, então todo o ser escuta. Há então uma posse direta do que está ali, diante de você, que nunca poderá ser ouvido com os ouvidos, nem compreendido com a mente. O jejum do coração esvazia as faculdades, liberta-as dos liames e das preocupações. O jejum do coração é a origem da unidade e da liberdade.”

“Já percebi”, disse-lhe Yen Hui. “O que me impedia de perceber era a minha própria autopreocupação. Se eu começar este jejum do coração, a autopreocupação desaparecerá. Então, ficarei livre das limitações e das preocupações! Não é isso o que o senhor quer dizer?”

“Sim”, disse-lhe Confúcio, “é isso mesmo! Se conseguir tal objetivo, você será capaz de ir ao mundo dos homens sem os perturbar. Não entrará em conflito com a imagem que eles fazem de si mesmos. Se eles o estiverem escutando, cante-lhes uma canção. Se não, fique em silêncio. Não tente arrombar-lhes a porta. Não tente novos medicamentos neles. Apenas coloque-se entre eles, porque nada há a fazer senão ser um dentre eles. Aí, então, você poderá obter sucesso!

É fácil permanecer quieto, sem deixar vestígios; o difícil é caminhar sem tocar no chão. Se seguir os métodos humanos, você poderá enfrentar a decepção. No caminho do Tao, nenhuma decepção é possível.

Você sabe que podemos voar com asas: ainda não aprendeu a voar sem elas. Já se familiarizou com a sabedoria dos que sabem, mas ainda não se familiarizou com a sabedoria dos que não sabem.

Olhe esta janela: nada mais é do que uma abertura na parede, mas, por causa dela, todo o quarto se encheu de luz. Assim, quando as faculdades se esvaziam, o coração está cheio de luz. Cheio de luz, ele torna-se uma influência por intermédio da qual os outros são secretamente transformados.”

## A MORTE COMO CONSELHEIRA

Rubem Alves

Lembra-te,  
antes que cheguem os maus dias,  
e se rompa o fio de prata,  
e se despedace o copo de ouro,  
e se quebre o cântaro junto à fonte,  
e se desfaça a roda junto ao poço...

Eclesiastes 12, 1-8

A vida está cheia de rituais para exorcizar a Morte. Agora, quando escrevo, dia 3 de janeiro de 1991, acabamos de passar por dois deles. É claro que não lhes damos este nome, pois o seu sucesso depende de que o Nome Terrível não seja ouvido. Para isto se faz uma barulheira enorme de sinos, fogos de artifício, danças, risos, muita comida, e alegria engarrafada... E tudo isso só para que a voz Dela não seja ouvida... Natal não é isto? Não existe uma tristeza solta no ar? O esforço desesperado de repetir um passado, fazer com que ele aconteça de novo? Encontrei, certa vez, numa loja nos Estados Unidos, um pacotinho de ervas e temperos num saquinho de plástico com o nome: “perfumes de Natal”. Tem de ser aqueles cheiros antigos, de infância. As músicas novas não servem, é preciso que as mesmas dos outros tempos sejam cantadas de novo. E que haja o mesmo rebuliço, os mesmos bolos, as mesmas frutas. Prepara-se a repetição do passado, para se ter a ilusão de que o tempo não passou. Melhor o incômodo da correria e da ressaca do que a dor de ouvir o que Ela está silenciosamente dizendo: “É, mas o tempo passou. Não pode ser recuperado. Você está passando...” Pensar dói muito. O Natal dói muito... E saímos da depressão da perda por meio de um outro ritual. Tolice imaginar que o tempo passou. Que nada. É um novo tempo que vem. Há muito tempo à espera. “Feliz Ano Novo!” E, no entanto, é tudo mentira. Certo está o poeta:

Mas o que não fui, o que nem sequer sonhei;  
o que só agora vejo que deveria ter feito,  
o que só agora claramente vejo que deveria ter sido  
isto é que é morto para além de todos os Deuses...  
Pode ser que para outro mundo eu possa levar o que sonhei.  
Mas poderei eu levar para outro mundo o que me esqueci de sonhar?

Esses, sim, os sonhos por haver, é que são o cadáver.  
 Enterro-os no meu coração para sempre, para todo o tempo,  
 para todos os universos...(Álvaro de Campos, Poesias, "Na noite  
 terrível...")

Não, não, a Morte não é algo que nos espera no fim. É companheira silenciosa que fala com voz branda, sem querer nos aterrorizar, dizendo sempre a verdade e nos convidando à sabedoria de viver.

O que ela diz? Coisas assim:

"Bonito o crepúsculo não? Veja as cores, como são lindas e efêmeras... Não se repetirão jamais. E não há formas de segurá-las. Inútil tirar uma foto. A foto será sempre a memória de algo que deixou de ser... E esta tristeza que a beleza dá? Talvez porque você seja como o crepúsculo... É preciso viver o instante. Não é possível colocar a vida numa caderneta de poupança..."

"Você sabe que horas são? Está ficando frio... E as cores do outono? Parece que o inverno está chegando..."

"O que é que você está esperando? Como se a vida ainda não tivesse começando... Como se você estivesse à espera de algum evento que vai marcar o início real da sua vida: formar, casar, criar os filhos, separar da mulher ou do marido, descobrir o verdadeiro amor, ficar rico, aposentar... Como se os seus instantes presentes fossem provisórios, preparatórios. Mas eles são a única coisa que existe..."

"E esta música que você está dançando? É de sua autoria? Ou é um Outro que toca e você dança? Quem é este Outro? Lembre-se do que disse o poeta 'Sou o intervalo entre o meu desejo e aquilo que os desejos dos outros fizeram de mim'. Mas, se você é isto, o intervalo, você já morreu... Acorde! Ressuscite!"

A branda fala da Morte não nos aterroriza por nos falar da Morte. Ela nos aterroriza por nos falar da Vida. Na verdade, a Morte nunca fala sobre si mesmo. Ela sempre nos fala sobre aquilo que estamos fazendo com a própria Vida, as perdas, os sonhos que não sonhamos, os riscos que não tomamos (por medo), os suicídios lentos que perpetrados.

"Lembra-te, antes que se rompa o fio de prata e se despedace o copo de ouro", e que seja tarde demais.

Uma das canções mais belas do Chico eu nunca ouvi tocada no rádio. Tenho perguntado, e pouca gente a conhece. Desconfio. É porque ela é a mansa sabedoria da Morte, que ninguém quer ouvir. Diz assim: "O velho sem conselhos, de joelhos, de partida, carrega com certeza todo o peso de sua vida. Então eu lhe pergunto sobre o amor... A vida inteira, diz que se guardou do carnaval, da brincadeira que ele não brincou... E agora, velho, o que é que eu

digo ao povo? O que é que tem de novo para deixar? Nada. Só a caminhada, longa, pra nenhum lugar... O velho, de partida, deixa a vida sem saudades, sem dívida, sem saldo, sem rival ou amizade. Então eu lhe pergunto pelo amor... Ele me diz que sempre se escondeu, não se comprometeu, nem nunca se entregou... E agora, velho, que é que eu digo ao povo? O que é que tem de novo pra deixar? Nada. Eu vejo a triste estrada aonde um dia eu vou parar. O velho vai-se agora, vai-se embora sem bagagem. Não sabe pra que veio, foi passeio, foi passagem. Então eu lhe pergunto pelo amor... Ele me é franco. Mostra um verso manco dum caderno em branco que já se fechou. E agora, velho, o que é que eu digo ao povo? O que é que tem de novo pra deixar? Não. Foi tudo escrito em vão...Eu lhe peço perdão mas não vou lastimar..." Parece até que o Chico e o Jorge Luís Borges entraram de acordo, pois este escreveu coisa muito parecida: "Instantes: Se eu pudesse viver novamente a minha vida, na próxima trataria de cometer mais erros. Não tentaria ser tão perfeito. Relaxaria mais. Seria mais tolo ainda do que tenho sido. Na verdade, bem poucas coisas levaria a sério. Seria até menos higiênico. Correria mais riscos, viajaria mais, contemplaria mais entardeceres, subiria mais montanhas, nadaria mais rios. Iria a lugares onde nunca fui, tomaria mais sorvete e menos sopa. Teria mais problemas reais e menos problemas imaginários. Eu fui uma destas pessoas que viveu sensata e produtivamente cada minuto de sua vida. Eu era uma destas pessoas que nunca ia a parte alguma sem um termômetro, uma bolsa de água quente, um guarda-chuva e um pára-quedas. Se voltasse a viver, viajaria mais leve. Se eu pudesse voltar a viver, começaria a andar descalço no começo da primavera e continuaria assim até o fim do outono. Daria mais voltas na minha rua, contemplaria mais amanheceres e brincaria com mais crianças, se tivesse outra vez uma vida pela frente. Mas, já viram, tenho 85 anos e sei que estou morrendo..."

É! Embora a gente não saiba, a Morte fala com a voz do poeta. Porque é nele que as duas, a Vida e a Morte, encontram-se reconciliadas, conversam uma com a outra, e desta surge a Beleza. Agora, o que a Beleza não suporta é o falatório, a correria... Ela nos convida a contemplar a nossa própria verdade. E o que ela nos diz é simplesmente isto: "Veja a vida. Não há tempo para perder. É preciso viver agora! Não se pode deixar o amor para depois. CARPE DIEM".

Foi esta a primeira lição do professor de literatura no filme "A sociedade dos poetas mortos". CARPE DIEM: agarre o dia! E o efeito de tal revelação poética, nascida da reconciliação da Vida com a Morte, é uma incontrolável explosão de liberdade. É só isto que nos dá coragem para arrebentar a mortalha com que os desejos dos outros nos enrolam e mumificam.

Tive um amigo, Hans Hoekendijk, um holandês que esteve prisioneiro num campo de concentração alemão. Contou-me de sua experiência com a morte. A guerra já chegava ao fim, e os prisioneiros acompanhavam num rádio clandestino o avanço das tropas aliadas e já faziam o cálculo dos dias que os separavam da liberdade. Até que o comandante da prisão reuniu a todos no pátio e informou que, antes da libertação, todos seriam enforcados. “Foi um grito de lamentação e horror...seguido da mais extraordinária experiência de liberdade que jamais tive em minha vida”, ele disse. “Se vou morrer dentro de dois dias, então nada mais importa. Não há sentido em me guardar, não há sentido em ser prudente. Não preciso pretender ser outra coisa do que sou. Posso viver a minha verdade, pois nada pode me acontecer. Não preciso de máscaras. Tenho a permissão para a honestidade total. Posso ir ao guarda nazista, que sempre me aterrorizou, e dizer a ele tudo o que sinto e penso...Que é que ele pode fazer? Posso ir até aquela mulher que sempre amei mas de quem nunca me aproximei (afinal, ela estava com o marido, e naqueles tempos isto era levado em consideração...) e pedir licença ao marido para confessar os sentimentos...Posso dizer tudo o que sinto mas que nunca me atrevi a dizer, por medo”. E me contou dessa experiência fantástica de liberdade e verdade que se tem quando se está pendurado sobre o abismo. A Morte tem o poder de colocar todas as coisas no seus devidos lugares. Longe do seu olhar, somos prisioneiros do olhar dos outros, e caímos na armadilha dos seus desejos. Deixamos de ser o que somos, para ser o que eles desejam que sejamos. Diante da Morte, tudo se torna repentinamente puro. Não há lugar para mentiras. E a gente se defronta então com a Verdade, aquilo que realmente importa. Para ter acesso à nossa Verdade, para ouvir de novo a voz do Desejo mais profundo, é preciso tornar-se um discípulo da Morte. Pois ela só nos dá lições de Vida, se a acolhermos como amiga. “A morte é nossa eterna companheira”- dizia D. Juan, o bruxo. “Ela se encontra sempre à nossa esquerda, ao alcance do braço. Ela nos olha sempre, até o dia que nos toca. Como é possível a alguém sentir-se importante, sabendo que a morte o contempla? O que você deve fazer, ao se sentir impaciente com alguma coisa, é voltar-se para sua esquerda e pedir que sua morte o aconselhe. Estamos cheios de lixo! E a morte é a única conselheira que temos. Sempre que você se sentir, como acontece sempre, que tudo está indo de mal a pior e que você se encontra a ponto de ser aniquilado, volte-se para a sua morte e lhe pergunte se isso é verdade. Sua morte lhe dirá que você está errado, que nada realmente importa, fora do seu toque. Ela lhe dirá: ‘Ainda não o toquei’. Alguém tem de mudar, e depressa. Alguém tem de aprender que a morte é uma caçadora e que ela se encontra sempre à nossa esquerda. Alguém tem de pedir o conselho da



morte e abandonar a maldita mesquinharia que pertence aos homens que vivem suas vidas como se a morte nunca fosse bater no seu ombro.”

Houve um tempo em que nosso poder perante a Morte era muito pequeno. E, por isso, os homens e as mulheres dedicavam-se a ouvir a sua voz e podiam tornar-se sábios na arte de viver. Hoje, nosso poder aumentou, a Morte foi definida como a inimiga a ser derrotada, fomos possuídos pela fantasia onipotente de nos livrarmos de seu toque. Com isso, nós nos tornamos surdos às lições que ela pode nos ensinar. E nos encontramos diante do perigo de que, quanto mais poderosos formos perante ela (inutilmente, porque só podemos adiar...), mais tolos nos tornamos na arte de viver. E, quando isso acontece, a Morte que poderia ser conselheira sábia transforma-se em inimiga que nos devora por detrás. Acho que, para recuperar um pouco da sabedoria de viver, seria preciso que nos tornássemos discípulos e não inimigos da Morte. Mas, para isso, seria preciso abrir espaço em nossas vidas para ouvir a sua voz. Seria preciso que voltássemos a ler os poetas...

## EM NOME DO AVÔ, DO NETO E DA BRINCADEIRA

Rubem Alves

O fato é que Deus se cansou de ser Deus. Eu também me cansaria. Lembrei-me de um poema de Pessoa: “Tenho dó das estrelas/ Luzindo há tanto tempo,/ Há tanto tempo.../ Tenho dó delas./ Não haverá um cansaço/ Das coisas, de todas as coisas,/ Um cansaço de existir,/ De ser,/ Só de ser?”. Deus deve sentir o cansaço das estrelas...

Segundo as Sagradas Escrituras, o universo começou com o cansaço. Deus se cansou das coisas do jeito como tinham sido desde toda a eternidade. Se não estivesse cansado delas – tédio - , não teria criado o mundo. Heine, poeta alemão, no seu poema “A Canção do Criador”, diz que Deus resolveu criar para se curar. “A doença foi a fonte do meu impulso criador”, diz Deus. “Criando, convalesci; criando, fiquei sadio de novo”.

Mas a doença era mais grave do que se pensava. Era feitiço. Feitiço , como se sabe, é uma palavra que gruda na outra pessoa e sobre ela opera uma transformação malvada. A bruxa diz “sapo”, o príncipe vira sapo. Foi isso que os homens fizeram: falaram demais sobre Deus. Grudaram n’Ele os seus pensamentos. E Ele ficou doente.

As intenções eram boas. Achavam que Deus tinha de ser o máximo. Anselmo, um dos teólogos mais importantes da tradição cristã, disse que Deus era “aquilo maior que pensar não se pode”. Assim, se saber é bom, segue-se logicamente que saber muito é melhor. E saber infinitamente é divino.

Deus, assim, tem de saber tudo: é onisciente. Ter poder é coisa boa: a gente anda, vê, faz amor, fala, come. O poder para fazer essas coisas dá alegria. Deus, alegria suprema por definição, tem logicamente de ter poder infinito, para estar eternamente alegre: ele é onipotente. E há o prazer da presença: a alegria de estar aqui, neste estúdio, cercado de objetos que me são caros, escrevendo. Mas, pelo fato de estar aqui, não estou nas montanhas nem nas praias. Minha presença aqui é a minha ausência de todos os outros lugares. Com Deus é diferente. Sua presença enche todos os espaços. Ele é onipresente.

Perfeições? Não as queria para mim. Ficaria louco instantaneamente. Borges escreveu um conto sobre um homem de memória perfeita: “Funes, o Memorioso”. A memória de Funes era tão perfeita que nela ficavam guardadas todas as folhas de uma árvore. Mas as folhas balançavam com o vento. A memória de Funes registrava cada alteração. Na memória de Funes não havia uma árvore. Havia infinitas árvores, cada uma delas com um nome diferente.

Tomem o Funes e o elevem ao infinito. Assim seria uma mente onisciente: ela conheceria todos os bateres de asas de todas as abelhas, de todos os beija-flores, de todas as moscas, de todos os insetos e todas as aves. Conheceria todos os espermatozóides nas ejaculações de todos os bichos; todos os movimentos de fezes e urinas; todas as sementes de capim; todos os cheiros e fedores; todos os pensamentos havidos e por haver; todas as letras, em todos os livros do mundo; todas as notas em todas as partituras musicais.

Pobre Deus! Não poderia descansar nem dormir. Seus olhos sem pálpebras jamais se fechariam. Não poderia gozar uma canção. Para escutar uma canção, é preciso que todas as outras sejam silenciadas. Mas a onisciência lhe proíbe isso. Nem poderia ler um livro de Saramago: ao texto do escritor português se misturariam os textos de todos os livros já escritos e por escrever.

O mesmo pode ser dito de todas as outras perfeições divinas. Eu odiaria estar presente em todos os lugares ao mesmo tempo. Estar presente em todos os lugares é não estar presente em lugar algum. E eu odiaria ser onipotente. A onipotência me tiraria o prazer de brincar. Brincar só tem graça se houver a possibilidade do erro. Tocar piano, jogar sinuca, cozinhar, escalar montanha, rodar pião, escrever um texto: tudo ficaria sem graça porque tudo daria sempre certo, magicamente. E não há nada mais chato que isso.

Alberto Caeiro contou, num poema, que o Menino Jesus se cansou do céu e fugiu para a terra, escorregando num raio de sol. “No céu tudo é estúpido, tudo é falso, em desacordo com flores e árvores e pedras. No céu ele tinha de estar sempre sério.” Preferiu ser um menino comum, que faz as coisas que os meninos comuns fazem. Mas, para que ninguém soubesse que ele fugira e se pusesse à sua procura, fez um milagre: montou uma farsa. Fez parecer que ele ainda estava no céu. Fugiu, deixando lá Deus pai e o Espírito Santo.

Caeiro é mestre em taoísmo. Mas não sabe muita as coisas da teologia. A verdade é outra. Não foi só o Menino Jesus que fugiu. Foi a Santíssima Trindade. Fugiram os três e deixaram a farsa montada. Fizeram isso por medo. Não de Herodes, mas dos teólogos e religiosos. Ficaram com medo de que eles comessem tudo de novo.

O Natal anuncia que Deus fugiu de ser Deus. Invejou os prazeres que os homens podiam ter e Ele não: dormir, tomar banho de cachoeira, chupar mexerica, brincar, fazer amor, ter de se esforçar por conseguir. A teologia cristã dá a isso o nome de “encarnação”. O Natal é Deus dizendo que divino, mesmo, é o humano.

Agora os três andam pela terra. Não mais como Pai, Filho e Espírito Santo (esses ficaram no céu), mas como avô, neto e brincadeira. Pai não serve. Tem de ser avô. E por que brincadeira em vez de Espírito Santo? Porque o

Espírito Santo, na tradição teológica ortodoxa, é o que acontece entre o Pai e o Filho (só para teólogos: é o “filioque”). Ora, o que acontece entre avô e neto é que eles brincam. Brincar é a mais divina de todas as atividades! Assim, em harmonia com o espírito da semana de Natal, sugiro que a grave fórmula litúrgica “em nome do Pai, do Filho e do Espírito Santo” seja substituída pela leve (pneumática) fórmula “em nome do avô, do neto e da brincadeira”.

## CAVALOS E HOMENS

### **A transformação espiritual de um homem de sangue e temperamento sicilianos.**

**Marco Frenette**

Essa short cut cabocla está há tempos cristalizada na memória coletiva de minha família, e me foi contada pela minha avó materna.

Corria o ano de 1929 quando ela se casou, no interior de São Paulo, com o homem que viria a ser meu avô. Casou-se contra a vontade dos pais, que queriam para a filha alguém com posses compatíveis à da família, e não um homem calado, pobre e solitário, que vivia num casebre ladeado por uns míseros metros quadrados de terra. Minha avó, porém, que era quase uma criança à época, fez valer a força de sua personalidade, e foi, sem levar absolutamente nada da família, viver na pobreza com o homem que amava.

No primeiro ano de casamento levaram um vida quase miserável. Dormiam apertados em uma cama de solteiro, cozinhavam nas únicas duas panelas que tinham, e trabalhavam arduamente no campo, esperando a recompensa futura da boa colheita. Os frutos da terra cultivada vieram no início do ano seguinte, quando conseguiram dinheiro suficiente para comprar mais um pedaço de terra e uma charrete para os passeios dominicais, a qual veio acompanhada de um magnífico cavalo. O animal, bonito e robusto, com pêlos brilhantes e escuros a cobrir-lhe os músculos bem definidos, tornou-se logo um elemento fundamental em suas vidas. Era a união da estética à funcionalidade. Ele servia tanto para as lidas de tração quanto para as de carga: de segunda a sábado trabalhava no campo; no domingo, levava meus avós para passear, ocasião em que a charrete lhe parecia uma pluma em comparação com o peso descomunal dos ferros do arado.

Numa manhã, quando um sol particularmente ardido iluminava aquela terra inculta, o jovem casal, sem imaginar que aquele dia seria especial, saiu para trabalhar no campo. Minha avó, à frente do animal, controlava a direção; enquanto meu avô ia atrás, equilibrando o arado e observando os sulcos que nasciam sob seus pés. Assim, trabalharam até o meio-dia, árdua e harmoniosamente. Foi quando o cavalo, extenuado e com fome, começou a parar, de quando em quando, para comer capim, virando a cabeça para alcançar os tufos mais suculentos. Quando acontecia isso, minha avó esperava, sem nenhuma pressa, o animal comer, para só depois reiniciar a aragem. Isso começou a irritar meu avô, que protestou contra as interrupções. Minha avó respondeu que não tinha coragem de impedir o animal de saciar a fome. Se o

marido quisesse fazer isso, que tomasse a dianteira. Foi quando trocaram de lugar. Araram mais um pouco a terra, e logo o cavalo avistou outro tufo de capim; fixou os olhos no alvo, e rumou em direção ao alimento, desviando-se totalmente da linha imaginária de aragem. Meu avô ainda tentou impedi-lo, puxando-o pelo cabresto, mas não teve a mínima chance contra a obstinação do animal. O cavalo, arrastando-o junto, chegou até o tufo, e pôs-se a comer. Ao ver o arado tombado, que deixara atrás de si, como se fosse um rabo, um sulco torto e inesperado no solo, meu avô foi invadido por um imenso e inexplicável rancor, que imediatamente se converteu em ódio. Foi quando estourou: o cavalo sentiu entrar nos focinhos o solado duro da bota de campanha que meu avô calçava. Ao receber aquela pancada fortíssima, o animal, sem emitir nenhum som, moveu-se um pouco para trás, e levantou a cabeça o máximo que pôde, como se pedisse clemência aos céus. E assim permaneceu, imóvel, com a cabeça levantada e os olhos ensopados de lágrimas. Meu avô ainda tentou empurrá-lo, mas o animal parecia uma estátua em sua imobilidade. Retesado de dor, tornava-se um monumento vivo, casual e fugaz, à estupidez humana. Frente àquela inesperada atitude, meu avô ficou-se perplexo, e ficou por um instante hipnotizado pela impressionante silhueta que se recortava, brilhante em seus contornos, contra o horizonte ensolarado. Quando o cavalo abaixou, lenta e dolorosamente, a cabeça, jorrou de suas narinas um sangue farto, que escureceu ainda mais uma terra já rubra por natureza. Ao ver aqueles focinhos estourados, meu avô teve consciência do que tinha feito, e finalmente entendeu que seu descontrole não tinha, a rigor, nada a ver com a atitude instintiva de um cavalo faminto; sua raiva era do mundo. Em questão de segundos rememorou todas as humilhações e privações por que tinha passado; então, descortinou-se para ele o entendimento de que sua fúria era filha de uma vida inteira afogada em infelicidade. Ao compreender, finalmente, de que mal sofria, desatou a chorar. Chorou um choro carregado de remorso, um choro profundo que foi molhando suas antigas réstias de resignação. Minha avó lembra como se fosse hoje: aquele homem desorientado, minado em suas forças, abraçado ao pescoço do cavalo. Ficou observando a cena a distância, não ousando interferir no que talvez fosse o primeiro contato de meu avô com sua própria humanidade: momento privilegiado de compreender e superar um sentimento de impotência para com a vida. Após um tempo, meu avô tirou a camisa molhada de suor e limpou delicadamente o focinho machucado. Depois, acariciou a fronte do animal, e afastou-se.

Nesse dia, não trabalharam mais. Voltaram para casa em silêncio, e assim meu avô permaneceu uma semana inteira, curtindo, num completo mutismo, a dolorosa lembrança daqueles dois grandes olhos mareados a lhe

pedir piedade. Foram noites e dias inteiros povoados por olhos negros, lágrimas, sangue e tufo de capim. Na semana seguinte, quando voltou a falar, minha avó espantou-se. A voz que ouvia parecia vir de outro homem. Meu avô transformara-se. Logo, o estranhamento que tomou conta dela estendeu-se também às pessoas que o conheciam. Um homem que tanto apreciava a caça, agora, desfazia-se dos rifles. Um siciliano que se orgulhava de pertencer a uma raça de fortes que não sabia o que era voltar para casa carregando desaforos, agora compreendia e perdoava os desafetos. As rinhas a céu aberto, onde furiosos galos índios sangravam ao luar, perdeu, de uma hora para outra, seu mais contumaz frequentador. Todos viam, também, que agora meu avô andava desarmado, livre do pesado Colt 44. Assim, todos que conheciam aquele italiano, outrora de sangue quente, foram se acostumando com aquela voz mansa, que pronunciava, às vezes com excessiva frequência, a palavra “paz”.

Minha avó me assegura que o homem doce, compreensivo e justo que conheci só passou a existir graças a esse incidente no campo, quando algo misterioso e definitivo ocorreu em seu interior, levando-o definitivamente para a senda da concórdia. Até sua morte, alguns anos atrás, ele soube manter domesticado o gênio violento. E o que me marcou nessa história foi a conversão psíquica de um homem que se tornou pessoa sem precisar encontrar o dalai-lama, sem precisar ler literatura esotérica, e sem ter de clamar, como um desesperado, pelo poder do sangue de Jesus. Na mudança radical de meu avô também não houve drogas nem álcool, e muito menos alucinógenos sagrados. Sua serenidade – que muitos anos depois tanto me impressionaria – veio ao acaso: dádiva de uma situação pagã, celebrada no sangue estranhamente purificador de um cavalo.

## **CARTA DO CHEFE SEATTLE PARA O GOVERNO DOS ESTADOS UNIDOS, 1852**

**Chefe Seattle**

“O Presidente, em Washington, informa que deseja comprar nossa terra. Mas como é possível comprar ou vender o céu, ou a terra? A Idéia nos é estranha. Se não possuímos o frescor do ar e a vivacidade da água, como vocês poderão comprá-los?

Cada parte desta terra é sagrada para meu povo. Cada arbusto brilhante do pinheiro, cada porção de praia, cada bruma na floresta escura, cada campina, cada inseto que zume. Todos são sagrados na memória e na experiência do meu povo.

Conhecemos a seiva que circula nas árvores, como conhecemos o sangue que circula em nossas veias. Somos parte da terra, e ela é parte de nós. As flores perfumadas são nossas irmãs. O urso, o gamo e a grande águia são nossos irmãos. O topo das montanhas, o húmus das campinas, o calor do corpo do pônei, e o homem, pertencem à mesma família.

A água brilhante que se move nos rios e riachos não é apenas água, mas o sangue de nossos ancestrais. Se lhes vendermos nossa terra, vocês deverão lembrar-se de que ela é sagrada. Cada reflexo espectral nas claras águas dos lagos fala de eventos e memórias na vida do meu povo. O murmúrio da água é a voz do pai do meu pai.

Os rios são nossos irmãos. Eles saciam nossa sede, conduzem nossas canoas e alimentam nossos filhos. Assim, é preciso dedicar aos rios a mesma bondade que se dedicaria a um irmão.

Se lhes vendermos nossa terra, lembrem-se de que o ar é precioso para nós, o ar partilha seu espírito com toda a vida que ampara. O vento, que deu ao nosso avô seu primeiro alento, também recebe seu último suspiro. O vento também dá às nossas crianças o espírito da vida. Assim, se lhes vendermos nossa terra, vocês deverão mantê-la à parte e sagrada, como um lugar onde o homem possa ir apreciar o vento, adocicado pelas flores da campina.

Ensinarão vocês às suas crianças o que ensinamos às nossas? Que a terra é nossa mãe? O que acontece à terra acontece a todos os filhos da terra.

O que sabemos é isto: a terra não pertence ao homem, o homem pertence à terra. Todas as coisas estão ligadas, assim como o sangue nos une a todos. O homem não teceu a rede da vida, é apenas um dos fios dela. O que quer que ele faça à rede, fará a si mesmo.



Uma coisa sabemos: nosso deus é também o seu deus. A terra é preciosa para ele e magoá-la é acumular contrariedades sobre o seu criador.

O destino de vocês é um mistério para nós. O que acontecerá quando os búfalos forem todos sacrificados? Os cavalos selvagens, todos domados? O que acontecerá quando os cantos secretos da floresta forem ocupados pelo odor de muitos homens e a vista dos montes floridos for bloqueada pelos fios que falam? Onde estarão as matas? Sumiram! Onde está a águia? Desapareceu! E o que será dizer adeus ao pônei arisco e à caça? Será o fim da vida e o início da sobrevivência.

Quando o último pele-vermelha desaparecer, junto com sua vastidão selvagem, e a sua memória for apenas a sombra de uma nuvem se movendo sobre a planície... estas praias e estas florestas ainda estarão aí? Alguma coisa do espírito do meu povo ainda restará?

Amamos esta terra como o recém-nascido ama as batidas do coração da mãe. Assim, se lhes vendermos nossa terra, amem-na como a temos amado. Cuidem dela como temos cuidado. Gravem em sua mentes a memória da terra tal como estiver quando a receberem. Preservem a terra para todas as crianças e amem-na, como Deus ama a todos.

Assim como somos parte da terra, vocês também são parte da terra. Esta terra é preciosa para nós, também é preciosa para vocês. Uma coisa sabemos: existe apenas um Deus. Nenhum homem, vermelho ou branco, pode viver à parte. Afinal, somos, irmãos.”

## AGRADECIMENTOS

Ao meus pais, Cidinha e Jorge, minha irmã, Érika, por tudo.

A minha família, em especial a Vó Cida, Vó Corina, Tia Lourdes, Tio Dide, Tio Mário, Tio Zé e ao grande amigo Ciro Corinthiano (Falim), meus sinceros agradecimentos pela amizade, carinho e pela minha formação humana.

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho pela orientação, amizade, confiança depositada e pelos grandes incentivos prestados no desenvolvimento deste trabalho.

A banca examinadora pelas correções e sugestões fornecidas.

A todas as pessoas que contribuíram na minha formação profissional e humana.

As belas mulheres, à cerveja e ao Rock'n Roll!

A todos os animais pelos ensinamentos de vida e oportunidade de me conhecer e me descobrir como um ser terreno, em especial ao meu grande amigo, irmão e mestre taoista Igor, um simpático cocker spaniel!

Aos cachorros: Jaqueline, Rapozinha, Toquinho e Beethoven pela amizade e passeios de final de semana.

Ao Corinthians e o Vasco da Gama pelos Grandes Títulos e Fortes Emoções!

Ao Benjamin Hoff, Luciano de Samósata, Sêneca, Lao Tsé, Krishnamurti, Joseph Campbell, Thomas Mann, Ilya Prigogine, Friedrich Nietzsche, Rubem Alves, Lucio Dalla, Belchior, Zé Ramalho, Gonzaguinha, Camisa de Vênus, Rollo May, Carl Sagan, Allan W. Watts, Clément Rosset, Cioran, Drausio Varela, Carlos Heitor Cony, Ludwig Feuerbach, Ronald D. Laing, Noam Chomsky, Milton Santos, Sebastião Salgado, Domenico de Masi, Chuang Tzu, Al Pacino, Robert de Niro, Jack Nickolson, Anthony Hopkins, Gary Oldman, Jeff Bridges, Darwin, Robert Louis Stevenson, Mary Shelley, Bram Stoker, Robert Fulghum, Hermann Hesse, Rabindranath Tagore, Heráclito de Éfeso, Dostoiewski, Erasmo de Rotterdam, Antoine de

Saint-Exupéry, Wilhelm Reich, Mário Monicelli, Roberto D'avila e Washington Novaes pelos grandes ensinamentos, decepções e dúvidas existenciais, questões estas fundamentais para o desenvolvimento de todo ser humano.

A Família Faccini, ao bom e velho amigo Eduardo Faccini Rocha (Wally Gator), ao grande amigo Fernando Faccini (Fernandinho), aos amigos de Sorocaba (Roger Mangusto e Companhia Limitada), ao amigo e figuraça Dair Bicudo Piai (Bicudão), a Dona Zariff e Família, aos amigos de Amparo (em especial aos do bar do Tustão e da soverteria do Felipe), a Família Vieira da Rocha, aos amigos de Santa Rita do Sapucaí, aos amigos de Porto Alegre (João Vicente Casol e Zabadal), a Família Chiaromonte; aos amigos da época de Graduação da UNICAMP e do Mestrado na COPPE, aos amigos Eduardo Cesar Dechechi (Rambo), ao grande Corinthiano Fabiano R. Perioto (Ratão), ao Alexandre Guerra, a Richard Martin Rojas Talavera (pelos Piscos) e Ramón Scheiffer, aos amigos do LOPCA e da UNICAMP, pelo companherismo, oportunidades de amadurecimento, festas, cervejas, paciência nos meus momentos de mau humor e pelas grandes risadas!

Aos amigos: José Alberto Domingues Rodrigues, Marlei Barboza, Eder Dutra Resende, Daiton de Freitas Rezende, Ricardo Belchior Tôrres (Grande Corinthiano e Vascaíno!!!), Pedro Leite de Santana (Pedrão), Dile Pontarolo Stremel (Foca Gaúcha), Luis Gonzaga Sales Vasconcelos, Edson Abel dos Santos Chiaromonte (Edinho), Jurema Leite Aragones, Hermeliza Postali, Lígia Postali, Jofre Vieira da Rocha (Jofrinho), Maria Vieira da Rocha (Dona Maria), Sebastião Vieira da Rocha (Sebá), Ricardo Bulgari (Arlindo Orlando), Wagner Tadeu Lasca (Tadeuzinho), Fernando Fernandes da Silva, Luiz Antônio de Souza, Iraí Santos Jr. (OwlMan), Alessandro Marra Ribas (Guerreiro Universal), Marcone Lopes da Silva, Adalberto Cardoso Lara Pinto (Meliante), Luiz Augusto C. Meleiro e Frede de Carvalho (Umbral) pelos grandes papos filosóficos e humanos!

Aos amigos Cristiano Roberto (Baco), Luciano de Moura Souza (Velhinho) e Wellington Silva (Pitinha, Corinthiano!!!), pelo companherismo, pela constante ajuda computacional e pelas festas à fantasia!

Aos amigos: Eduardo José Corrêa, João Nazareno Nonato Quaresma e Emanuel Negrão Macêdo pela inestimável ajuda na compreensão do método de redução de Hermite e a José Alberto Domingues Rodrigues e Marlei

Barboza pelos estudos e conversas sobre modelagem, métodos numéricos e controle.

Aos amigos de República: Eduardo Faccini Rocha (Wally Gator), Fernando Faccini (Fernandinho), Eduardo César Dechechi (Rambo), Chang Chung Wei (Changão), Dile Pontarolo Stremel (Foca Gaúcha), Iraí Santos Jr. (OwlMan) e Alexandre Teixeira de Souza (Didi) pela convivência, risadas e até pelos insuportáveis roncos!!!

Aos amigos Cristiano Roberto (Baco), Luciano de Moura Souza (Velhinho), Wellington Silva (Pitinha), Ricardo Belchior Tôrres (Ricardão), Daiton de Freitas Rezende, Iraí Santos Jr. (Owlman), Rogério Favinha Martin, Edwin Carvalho e Papa Amadou Gueye pelos papos de futebol, almoços e risadas!

Como bar é Cultura, aos amigos, figuras folclóricas e colegas das cervejas, festas, papos de futebol e risadas; a turma da Boemia!

- Bar da Química: Marcone, João Vicente Macieira, José Wilson Xaropinho, Basilino, Dilão (Foca Gaúcha), Arlan, Alex Pará, João Santista, Igor, Roma (Everaldo), Marlus, Espeto, Ribas, Rubens Vascaino, Eder, Luiz Meleiro, Tuba (Jair), Rambo, Iraí Owlman, Adriana, Gaúcha, Marcão Corinthiano, etc.
- Sorocaba: Roger Mangusto, Eduardo Rex, Fernandinho, Marcos Pesco, Claudio, Bicudão, Tadeu Morsa, Kadú, Marcos Gatão, Dimas, Jique, Jabá, Fernandinho Ramirez, Robertão, Paulo Edson, Roger Mentiolate, Denilson, Gimenez, Wagner Noivo e as Meninas: Claudia, Tereza, Kika, Nívea e Namoradas do Pesco, etc.
- Bar do Felipe e do Cabana: Sebá, Magal (Cachorrão), Panhan, Ticão, Fran, Mazolinha, João Colega, Messias (Sandro), Gatinho, Gatão, Pezão, Sandrão, Valdeci, Dir, Décio, Marcão, Narciso Coringão, Casiano, Franz, João Claudio, Tchélão, Peixe, Marcelo Fagundes, Zé Carlos, Gil, etc.
- Bar do Tustão: Tadeu, Binho, Pascoal Papapá, Edson, Tinho, Fisca, Betão, Thicô, Veronesi, Bulgari, Dago, Gerson, Ferrinho, Edmur, Tustão, Dé, Catanesi, etc.
- Santa Rita do Sapucaí: Peixe, Tchélão, Lecão, Rafael, Pezão, Nazista, etc.

## SUMÁRIO

<b>RESUMO/ABSTRACT</b>	xxix
<b>LISTA DE FIGURAS</b>	xxxii
<b>LISTA DE TABELAS</b>	xliv
<b>NOMENCLATURA</b>	xliv
<b>CAPÍTULO I</b>	01
I.1    Objetivos	01
I.2    Organização do Trabalho	02
<b>CAPÍTULO II – REATOR CATALÍTICO DE LEITO FIXO</b>	03
II.1   Introdução	03
II.2   Reatores Catalíticos	05
II.3   Modelos Matemáticos	09
II.4   Simplificações dos Modelos Matemáticos	15
II.5   Conclusões	17
<b>CAPÍTULO III – MODELOS DESENVOLVIDOS</b>	18
III.1   Introdução	18
III.2   Reação de Oxidação Catalítica do Etanol a Acetaldeído	18
III.2.1   Equação da Taxa de Reação com Catalisador de Fe-Mo	19
III.2.2   Equação da Taxa de Reação com Catalisador de Cobre Oxidado	20
III.3   Modelos Bidimensionais	21
III.3.1   Modelo Pseudo Homogêneo Clássico	23
III.3.2   Modelo Pseudo Homogêneo Modificado	25
III.3.2.1   Modelo baseado em Jutan et al.	26
III.3.2.2   Modelo de Toledo e Maciel Filho	28
III.4   Técnicas de Redução	30
III.5   Modelos Unidimensionais	37
III.6   Métodos Numéricos	51
III.6.1   Colocação Ortogonal	51

III.6.2	Linearização	51
III.6.3	Integração Numérica	55
III.7	Conclusões	55
<b>CAPÍTULO IV – SIMULAÇÕES ESTACIONÁRIA E DINÂMICA</b>		<b>57</b>
IV.1	Introdução	57
IV.2	Regime Estacionário	57
IV.3	Regime Transiente	75
IV.3.1	Modelo Bidimensional	78
IV.3.2	Modelo Unidimensional	113
IV.4	Conclusões	122
<b>CAPÍTULO V – ANÁLISE DE SENSIBILIDADE</b>		<b>125</b>
V.1	Introdução	125
V.2	Análise de Sensibilidade das Variáveis do Processo Através do Planejamento Fatorial	125
V.3	Conclusões	137
<b>CAPÍTULO VI – CONTROLE DE REATORES DE LEITO FIXO</b>		<b>138</b>
VI.1	Introdução	138
VI.2	PID	141
VI.3	DMC	142
VI.4	GPC	143
VI.5	STGPC	144
VI.6	Controle Monovariável – SISO	144
VI.7	Controle Multivariável – MIMO	159
VI.8	Conclusões	186
<b>CAPÍTULO VII – CONCLUSÕES E SUGESTÕES</b>		<b>187</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>		<b>189</b>
<b>APÊNDICE I</b>		<b>208</b>

Taxa de Reação para a Oxidação Catalítica do Etanol a Acetaldeído sobre o Catalisador de Fe-Mo

<b>APÊNDICE II</b>	<b>211</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Taxa de Reação para a Oxidação Catalítica do Etanol a Acetaldeído sobre o Catalisador de Cobre Oxidado;</li> <li>• Modelos do Reator utilizando a Taxa de Reação com Catalisador de Cobre Oxidado;</li> <li>• Simulações Estacionária e Dinâmica.</li> </ul>	
<b>APÊNDICE III</b>	<b>226</b>
Propriedades Físicas, Coeficientes de Transferência, Parâmetros Operacionais e de Projeto do Reator Catalítico de Leito Fixo	
<b>APÊNDICE IV</b>	<b>237</b>
Demonstração Matemática da Técnica de Redução Adotada por Maciel Filho (1989)	
<b>APÊNDICE V</b>	<b>245</b>
Método da Colocação Ortogonal	
<b>APÊNDICE VI</b>	<b>262</b>
Solução de Sistemas de Equações Algébricas Não-Lineares	
<b>APÊNDICE VII</b>	<b>270</b>
Métodos de Solução de Sistema de Equações Não-Lineares	
<b>APÊNDICE VIII</b>	<b>286</b>
Algoritmo Clássico	
<b>APÊNDICE IX</b>	<b>288</b>
Algoritmos Preditivos e Adaptativo	

**APÊNDICE X** 332

Cômputo Recursivo dos Parâmetros da Equação Diophantina

**APÊNDICE XI** 335

Determinação dos Coeficientes de  $G'_j$  e  $\Gamma_j$



## RESUMO

Neste trabalho são apresentados modelos pseudo-homogêneos bi e unidimensionais de reatores catalíticos de leito fixo, os quais incorporam as capacidades térmicas do fluido e do sólido,  $(\rho C_p)_f$  e  $(\rho C_p)_s$ , respectivamente. Os modelos propostos reproduzem o comportamento dinâmico esperado de um reator catalítico de leito fixo, inclusive o fenômeno da resposta inversa. A solução dos modelos bidimensionais geralmente requerem excessivo tempo computacional, uma vez que uma descrição detalhada das variáveis é levada em conta na formulação do modelo, resultando em modelos matemáticos de difícil solução. Para superar esta dificuldade, fez-se uso de técnicas de redução de modelos, as quais permitem gerar modelos com dimensões espaciais menores (com redução dimensional) ou cuja solução se torna menos complexa (sem redução dimensional). Portanto, neste trabalho também é apresentado um estudo comparativo do desempenho destas técnicas. Com relação aos modelos reduzidos, alguns apresentaram uma boa concordância com o modelo bidimensional, possibilitando a utilização segura e rápida dos mesmos para estudos de controle e otimização.

Outro estudo realizado neste trabalho foi a análise de sensibilidade paramétrica do reator catalítico de leito fixo visando obter o conhecimento dos efeitos primários e de interação dos parâmetros operacionais do reator necessários à implementação da estratégia de controle no reator de forma adequada. Para obter estes conhecimentos utilizou-se o método do planejamento fatorial, o qual foi capaz de captar os efeitos primários e de interação no comportamento dinâmico do reator. Outro detalhe importante é que o método do fatorial completo forneceu também os efeitos ao longo do tempo, conhecimento este não disponível quando se utiliza, por exemplo, o método do RGA.

Finalmente, após o desenvolvimento de modelos dinâmicos adequados para aplicações em tempo real e de posse dos conhecimentos do comportamento dinâmico e da análise de sensibilidade paramétrica, realizou-se o estudo da análise de desempenho de alguns algoritmos de controle avançados. Utilizou-se para o estudo da análise de desempenho dos controladores avançados, os algoritmos de controle preditivos, DMC ("Dynamic Matrix Control") e GPC ("Generalized Predictive Control"), e o adaptativo preditivo, STGPC (GPC acoplado ao identificador de parâmetros RLS), tanto na forma monovariável, SISO, como multivariável, MIMO. Estes controladores também foram comparados com o controlador clássico PI. Observou-se que os controladores GPC e STGPC proporcionaram os

melhores resultados, mostrando a necessidade de se utilizar controladores avançados para obter um comportamento seguro e eficiente do reator catalítico de leito fixo

## ABSTRACT

In this work, pseudo-homogeneous bi- and uni-dimensional fixed bed catalytic reactors are presented. Such models incorporate the fluid and solid thermal capabilities,  $(\rho C_p)_f$  e  $(\rho C_p)_s$ , respectively. The proposed models reproduce a dynamic behaviour expected in a fixed bed catalytic reactor, including the inverse response phenomenon. The bi-dimensional models solution usually requires excessive computing (CPU) time since a detailed description of the variables is considered in the formulation of the model, which results in mathematical models of difficult solution.

To circumvent this difficulty, techniques of model reduction were used, which permitted the generation of smaller space dimensions (with dimension reduction) or whose solution is less complex (without dimension reduction). Therefore, a comparative work of both techniques performance is also presented in this work. Some of the reduced models presented a good agreement with the bi-dimensional model, thus enabling their safe and fast utilization for studies of control and optimization.

Another study performed in this work was the parametric sensitivity analysis of the fixed bed catalytic reactor, with the purpose of knowing the primary effects and the interaction of the reactor operating parameters, which are necessary for the implementation of a suitable control strategy. A method of factorial planning was used to acquire this knowledge. It was capable of getting the primary and interaction effects on the reactor dynamic behaviour. Another important detail is that the complete factorial method also provided some effects against time; this kind of knowledge is not available when the method RGA is used.

Last, with the development of dynamic models for applications in real time and with the knowledge of the dynamic behaviour and the parametric sensitivity analysis, an analysis of the performance of some advanced control algorithms was made. In the study of the analysis of the performance of advanced controllers, the control algorithms used were predictive, DMC and GPC, and adaptive predictive, STGPC (GPC coupled to the parameters identifier RLS), both in the monovariable (SISO) and multivariable (MIMO) forms. These controllers were also compared to the classic controller PI. It was observed that the controllers GPC and STGPC provided the best results, showing the need of using advanced controllers to obtain a reliable and efficient behaviour for the fixed bed catalytic reactor.

## LISTA DE FIGURAS

### Capítulo II

Figura II.1	Esquema Geral de um Reator Catalítico de Leito Fixo	05
Figura II.2	Aspectos Tratados na Modelagem de um Reator Catalítico de Leito Fixo	12
Figura II.3	Classificação dos Modelos para um Reator Catalítico de Leito Fixo	14

### Capítulo IV

#### Regime Estacionário

Figura IV.1	Perfil Estacionário da Conversão do Reator	58
Figura IV.2	Perfil Estacionário da Temperatura do Reator	59
Figura IV.3	Perfil Estacionário da Temperatura de Refrigeração do Reator	59
Figura IV.4	Perfil Estacionário da Pressão do Reator	60
Figura IV.5	Perfil Estacionário da Conversão do Reator	60
Figura IV.6	Perfil Estacionário da Temperatura do Reator	61
Figura IV.7	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator	62
Figura IV.8	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator	62
Figura IV.9	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $T_{fo}$	64
Figura IV.10	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator. Efeito da variação em $T_{fo}$	64
Figura IV.11	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $T_{ro}$	65
Figura IV.12	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator. Efeito da variação em $T_{ro}$	65
Figura IV.13	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $R$	66
Figura IV.14	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator. Efeito da variação em $R$	66
Figura IV.15	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $G_1$	67
Figura IV.16	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do	

	Reator. Efeito da variação em $G_i$	67
Figura IV.17	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $p_o$	68
Figura IV.18	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator. Efeito da variação em $p_o$	68
Figura IV.19	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $u_R$	69
Figura IV.20	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator. Efeito da variação em $u_R$	69
Figura IV.21	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $D_t$	71
Figura IV.22	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator. Efeito da variação em $D_t$	71
Figura IV.23	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $D_p$	72
Figura IV.24	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator. Efeito da variação em $D_p$	72
Figura IV.25	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator. Efeito da variação em $L$	73
Figura IV.26	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator. Efeito da variação em $L$	73

## Regime Transiente

### Modelo Bidimensional

Figura IV.27	Malha de Pontos Gerados pela Colocação Dupla	77
Figura IV.28	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	79
Figura IV.29	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	79
Figura IV.30	Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	80
Figura IV.31	Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	80
Figura IV.32	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{fo}$	81
Figura IV.33	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{fo}$	81

Figura IV.34	Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{fo}$	82
Figura IV.35	Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{fo}$	82
Figura IV.36	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{ro}$	83
Figura IV.37	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{ro}$	84
Figura IV.38	Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{ro}$	84
Figura IV.39	Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{ro}$	85
Figura IV.40	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{ro}$	85
Figura IV.41	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{ro}$	86
Figura IV.42	Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{ro}$	86
Figura IV.43	Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{ro}$	87
Figura IV.44	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	88
Figura IV.45	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	88
Figura IV.46	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido de Refrigeração Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	89
Figura IV.47	Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	89
Figura IV.48	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $G_i$	90
Figura IV.49	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $G_i$	90
Figura IV.50	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido de Refrigeração Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $G_i$	91
Figura IV.51	Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $G_i$	91
Figura IV.52	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $R$	92
Figura IV.53	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito	

	da variação positiva em R	93
Figura IV.54	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido de Refrigeração Axial do Reator. Efeito da variação positiva em R	93
Figura IV.55	Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em R	94
Figura IV.56	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação negativa em R	94
Figura IV.57	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em R	95
Figura IV.58	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido de Refrigeração Axial do Reator. Efeito da variação negativa em R	95
Figura IV.59	Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator. Efeito da variação negativa em R	96
Figura IV.60	Perfil Dinâmico das Temperaturas Radiais e Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	98
Figura IV.61	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	98
Figura IV.62	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{fo}$	99
Figura IV.63	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{ro}$	99
Figura IV.64	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{ro}$	100
Figura IV.65	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	100
Figura IV.66	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	101
Figura IV.67	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	101
Figura IV.68	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	102
Figura IV.69	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $G_i$	102
Figura IV.70	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em R	103
Figura IV.71	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da Linearização na Taxa de Reação	103
Figura IV.72	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{ro}$	104

Figura IV.73	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	104
Figura IV.74	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	105
Figura IV.75	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{ro}$	105
Figura IV.76	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{ro}$	106
Figura IV.77	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_i$	106
Figura IV.78	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	107
Figura IV.79	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	107
Figura IV.80	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	108
Figura IV.81	Superfície Dinâmica da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	109
Figura IV.82	Superfície Dinâmica da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	109
Figura IV.83	Superfície Dinâmica da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{fo}$	110
Figura IV.84	Superfície Dinâmica da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação negativa em $T_{fo}$	110
Figura IV.85	Superfície Dinâmica da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_r$	111
Figura IV.86	Superfície Dinâmica da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_r$	111
Figura IV.87	Superfície Dinâmica da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	112
Figura IV.88	Superfície Dinâmica da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_r$	112

### Modelo Unidimensional

Figura IV.89	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	114
Figura IV.90	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	114



Figura IV.91	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	115
Figura IV.92	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	115
Figura IV.93	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	116
Figura IV.94	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	116
Figura IV.95	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	117
Figura IV.96	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	117
Figura IV.97	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_r$	118
Figura IV.98	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $G_1$	118
Figura IV.99	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	119
Figura IV.100	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	119
Figura IV.101	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	120
Figura IV.102	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	120
Figura IV.103	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	121
Figura IV.104	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	121
Figura IV.105	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	122

## Capítulo V

Figura V.1	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro $T_{fo}$	128
Figura V.2	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro $T_{fo}$	129
Figura V.3	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro $T_{fo}$	129
Figura V.4	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro $T_r$	130
Figura V.5	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro $T_r$	130
Figura V.6	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro $T_r$	131

Figura V.7	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro GM	131
Figura V.8	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro GM	132
Figura V.9	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro GM	132
Figura V.10	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro R	133
Figura V.11	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro R	133
Figura V.12	Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro R	134

## Capítulo VI

Figura VI.1	Diagrama de Blocos de um Controlador Adaptativo	141
-------------	---	-----

### Controle Monovariável – SISO

Figura VI.2	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	148
Figura VI.3	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	149
Figura VI.4	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	149
Figura VI.5	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	150
Figura VI.6	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	150
Figura VI.7	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	151
Figura VI.8	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	151
Figura VI.9	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	152
Figura VI.10	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	152
Figura VI.11	Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	153
Figura VI.12	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	153
Figura VI.13	Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	154
Figura VI.14	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	154

Figura VI.15	Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em $T_{fo}$	155
Figura VI.16	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em $T_{fo}$	155
Figura VI.17	Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em $T_{fo}$	156
Figura VI.18	Controle Regulatório/Estocástico de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em $T_{fo}$	156
Figura VI.19	Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em $T_{fo}$	157
Figura VI.20	Comportamento Dinâmico no Final do Reator Catalítico de Leito Fixo	157
Figura VI.21	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	158
Figura VI.22	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	158

#### Controle Multivariável – MIMO

Figura VI.23	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	162
Figura VI.24	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	163
Figura VI.25	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	163
Figura VI.26	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	164
Figura VI.27	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	164
Figura VI.28	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	165
Figura VI.29	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	165
Figura VI.30	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	166
Figura VI.31	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em $T_{fo}$	166
Figura VI.32	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em $T_{fo}$	167

Figura IV.33	Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	167
Figura VI.34	Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	168
Figura VI.35	Controle Regulatório/Estocástico de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	168
Figura VI.36	Controle Regulatório/Estocástico de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	169
Figura IV.37	Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	169
Figura VI.38	Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	170
Figura VI.39	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	170
Figura VI.40	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	171
Figura VI.41	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	171
Figura VI.42	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	172
Figura VI.43	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	172
Figura VI.44	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	173
Figura VI.45	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	173
Figura VI.46	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	174
Figura VI.47	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	174
Figura VI.48	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	175
Figura VI.49	Controle Supervisório/Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point e Perturbação em Tfo	175
Figura VI.50	Controle Supervisório/Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point e Perturbação em Tfo	176
Figura VI.51	Variável Manipulada do Controle	

	Supervisório/Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point e Perturbação em Tfo	176
Figura VI.52	Variável Manipulada do Controle Supervisório/Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point e Perturbação em Tfo	177
Figura VI.53	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	177
Figura VI.54	Controle Regulatório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	178
Figura IV.55	Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	178
Figura IV.56	Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	179
Figura VI.57	Controle Regulatório/Estocástico de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	179
Figura VI.58	Controle Regulatório/Estocástico de Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	180
Figura IV.59	Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	180
Figura VI.60	Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo. Perturbação em Tfo	181
Figura VI.61	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	181
Figura VI.62	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	182
Figura VI.63	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	182
Figura VI.64	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	183
Figura VI.65	Comportamento Dinâmico no Final do Reator Catalítico de Leito Fixo	183
Figura VI.66	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	184
Figura VI.67	Controle Supervisório de Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	184
Figura VI.68	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	185

Figura VI.69	Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo. Mudança de Set Point	185
--------------	---	-----

## Apêndice II

### Regime Estacionário e Dinâmico

Figura AII.1	Perfil Estacionário da Conversão do Reator	220
Figura AII.2	Perfil Estacionário da Conversão do Reator	220
Figura AII.3	Perfil Estacionário da Temperatura do Reator	221
Figura AII.4	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator	221
Figura AII.5	Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator	222
Figura AII.6	Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator	222
Figura AII.7	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_r$	223
Figura AII.8	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_r$	223
Figura AII.9	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_r$	224
Figura AII.10	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_r$	224
Figura AII.11	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação positiva em $T_{fo}$	225

## Apêndice V

Figura AV.1	Malha dos Pontos Gerados pela Colocação Ortogonal Dupla	251
Figura AV.2	Malha dos Pontos Gerados pela Colocação Ortogonal Simples	256
Figura AV.1	Malha dos Pontos Gerados pela Colocação Ortogonal Dupla em Elementos Finitos	261

## Apêndice VI

Figura AVI.1	Solução do Estado Estacionário do Reator	266
Figura AVI.2	Solução do Estado Estacionário do Reator	267
Figura AVI.3	Solução do Estado Estacionário do Reator	267

Figura AVI.4	Solução do Estado Estacionário do Reator	268
--------------	--	-----

## Apêndice VII

Figura AVII.1	Caminho Homotópico	272
Figura AVII.2	Algoritmo Simplificado da Homotopia Clássica	275
Figura AVII.3	Algoritmo Simplificado da Homotopia Perpendicular ao Parâmetro $t$	279

## Apêndice IX

Figura AIX.1	Estratégia de Predição de Longo Alcance	289
Figura AIX.2	Modelo de Entrada e Saída	290
Figura AIX.3	Modelo CARMA	294
Figura AIX.4	Modelo CARIMA	294
Figura AIX.5	Diagrama de Blocos de um Controlador Adaptativo	331

## LISTA DE TABELAS

### Capítulo V

Tabela V.1	Níveis dos Fatores Estudados no Modelo Bidimensional	127
Tabela V.2	Matriz do Planejamento Fatorial Completo	127

### Capítulo VI

Tabela VI.1	1º Caso de Estudo de Controle Multivariável	159
Tabela VI.2	2º Caso de Estudo de Controle Multivariável	159
Tabela VI.3	3º Caso de Estudo de Controle Multivariável	160

### Apêndice I

Tabela AI.1	Parâmetros Cinéticos da Taxa de Reação com Catalisador de Fe-Mo	210
-------------	---	-----

### Apêndice II

Tabela AII.1	Parâmetros Cinéticos da Taxa de Reação com Catalisador de Cobre Oxidado	214
--------------	---	-----

### Apêndice VI

Tabela AVI.1	Valor das Derivadas das Funções do Regime Dinâmico utilizando CONJUNTO1	268
Tabela AVI.2	Valor das Derivadas das Funções do Regime Dinâmico utilizando CONJUNTO2	269

### Apêndice VII

Tabela AVII.1	Funções $g(x)$ mais comuns	273
---------------	----------------------------	-----



## NOMENCLATURA

## I – Modelo do Processo

$a_m$	área de transferência de calor do catalisador	$(m^2/kgcat)$
$B_{ih}$	número de Biot térmico	
$B_{ih}^*$	número de Biot modificado	
$C_{pf}$	calor específico mássico do gás	$(kcal/kg.K)$
$C_{PR}$	calor específico mássico do fluido refrigerante	$(kcal/kg.K)$
$C_{ps}$	calor específico do catalisador	$(kcal/kg.K)$
$D_{ef}$	difusividade efetiva radial	$(m^2/h)$
$D_{efi}$	difusividade efetiva radial intersticial	$(m^2/h)$
$D_p$	diâmetro da partícula	$(m)$
$D_t$	diâmetro do reator	$(m)$
$f$	fator de fricção de Ergun	
$GM$	velocidade de fluxo mássico do gás	$(kg/m^2.h)$
$G$	velocidade de fluxo mássico superficial do gás	$(kg/m^2.h)$
$G_i$	velocidade de fluxo mássico intersticial do gás	$(kg/m^2.h)$
$h_w$	coeficiente de transferência de calor na parede interna do reator	$(kcal/m^2.h.K)$
$h_f$	coeficiente de transferência de calor entre o sólido e o gás	$(kcal/m^2.h.K)$
$K_i$ de RW1	"iésimo constante cinética da taxa de reação	$(NI/min.gcat.atm)$
$K_i$ de RW2	"iésimo constante cinética da taxa de reação	$(Kmol/m^2.h.atm)$
$L$	comprimento do leito	$(m)$
$L_i$	comprimento adimensional do elemento de colocação	
$N_i$	número de pontos de colocação num elemento	
$N$	número de pontos de colocação	
$P_i, p_i$	pressão parcial da substância i	$(atm)$
$P, p$	pressão adimensional do gás	
$P_o, p_o$	pressão de entrada do gás	$(atm)$

$P_{ref}$	pressão de referência do gás	(atm)
PM	peso molecular da mistura reacional	(kg/kmol)
R	relação molar de alimentação ar/etanol	
r	coordenada radial adimensional	
$R_t$	raio do reator	(m)
RW1	taxa de reação de oxidação do etanol a acetaldeído com catalisador de Fe-Mo	(NI/min.gcat)
RW2	taxa de reação de oxidação do etanol a acetaldeído com catalisador de Cobre Oxidado	(kmol/m <sup>2</sup> .h)
T	temperatura adimensional do reator	
$T_{fo}$	temperatura de alimentação do gás	(K)
$T_g$	temperatura adimensional do gás	
$T_m$	temperatura radial média adimensional do reator	
$T_R$	temperatura adimensional do fluido refrigerante	
$T_{R0}$	temperatura da alimentação do fluido refrigerante	(K)
$T_s$	temperatura adimensional do sólido	
$T(1,z,t)$	temperatura adimensional da parede do reator	
$T_{ref}$	temperatura de referência	(K)
$V_f$	velocidade superficial do gás	(m/h)
$u_R$	velocidade do fluido refrigerante	(m/h)
X	conversão do etanol a acetaldeído	
$X_1$	conversão do etanol a acetaldeído	
$X_2$	conversão do etanol a gás carbônico	
$X_m$	conversão radial média do reator	
$y_i$	fração molar da substância i	
z	coordenada axial adimensional	
$\varepsilon$	porosidade do leito	
$\rho_B$	densidade aparente do leito catalítico	(kgcat/m <sup>3</sup> )
$\rho_s$	densidade do catalisador	(kg/m <sup>3</sup> )
$\rho_f$	densidade do fluido reagente	(kg/m <sup>3</sup> )
$\rho_R$	densidade do fluido refrigerante	(kg/m <sup>3</sup> )
$\Delta H_R$	entalpia de reação molar do etanol a	

	acetaldeído	(kcal/kmol)
$\Delta H_{R1}$	entalpia de reação molar do etanol a acetaldeído	(kcal/kmol)
$\Delta H_{R2}$	entalpia de reação molar do etanol a gás carbônico	(kcal/kmol)
$\lambda_{ef}$	condutividade térmica efetiva radial	(kcal/m.h.K)
$\Phi$	rendimento global	

## II – Modelo Interno

$A(q^{-1})$	polinômio de grau na
$a_i$	coeficientes de $A(q^{-1})$
$B(q^{-1})$	polinômio de grau nb
$b_i$	coeficientes de $B(q^{-1})$
$C(q^{-1})$	polinômio de grau nc
$c_i$	coeficientes de $C(q^{-1})$
$H(q^{-1})$	polinômio com número infinito de termos
$h_i$	coeficientes da resposta do processo a um pulso unitário
$N$	número de termos da convolução
$x(t)$	termo de perturbação
$y(t)$	saída do processo na forma de variável desvio
$u(t)$	ação de controle na forma de variável desvio
$t_D$	tempo morto
$\xi(t)$	ruido branco
$\eta(t)$	processo de Markov
$\beta$	parâmetro que confere ação integral variável
cov	covariância
$\Delta$	operador deslocamento ( $1 - q^{-1}$ )
$\delta$	função delta de Kronecker
$E$	esperança matemática
$\sigma^2$	variança
$\tau$	deslocamento no tempo

## III – PID

$K_c$	constante proporcional
$T_I$	tempo integral
$T_D$	tempo derivativo

$T_A$	tempo de amostragem
$e(t)$	“set point” – variável controlada

## IV – DMC

$A$	matriz dinâmica
$\approx$	
$E$	vetor de erros preditos
$\sim$	
$E'$	vetor de ações passadas
$\sim$	
$H$	matriz de coeficientes de resposta ao impulso
$\approx$	
$J$	critério de custo quadrático
$L$	horizonte de predição
$N$	ordem do modelo de convolução
$P_j$	vetor de ações de controle passadas
$\sim$	
$Q$	matriz de supressão de movimentos das variáveis controladas
$\approx$	
$R$	matriz de supressão de movimentos das variáveis manipuladas
$\approx$	
$R$	horizonte de predição
$u$	vetor de variáveis manipuladas
$\sim$	
$y$	vetor de variáveis controladas
$\sim$	
$\alpha$	matriz de constantes da trajetória de referência
$\approx$	
$\lambda$	fator de supressão

## índices

$\wedge$	valor predito
$c$	valor corrigido
$d$	valor desejado
$sp$	“set point”

## V – GPC

$n$	número de malhas de controle
$A$	matriz que contém os polinômios $A_i(q^{-1})$
$\approx$	

$B$	matriz que contém os polinômios $B_{ij}(q^{-1})$
$\approx$	
$C$	matriz que contém os polinômios $C_i(q^{-1})$
$\approx$	
$y$	vetor de saídas
$\sim$	
$u$	vetor de ações de controle
$\sim$	
$\xi$	vetor de ruído branco
$\sim$	
$E_j(q^{-1})$	polinômio de grau $j-1$
$E_j$	matriz que contém os polinômios $E_{ij}(q^{-1})$
$\approx$	
$F_j(q^{-1})$	polinômio de grau $\max(n_a, n_c)$
$F_j$	matriz que contém os polinômios $F_{ij}(q^{-1})$
$\approx$	
$G_j(q^{-1})$	polinômio definido como sendo $E_j(q^{-1}) B(q^{-1})$
$G_j(q^{-1})$	Matriz de polinômios definidos como sendo $E_j B$
$\approx$	$\approx \approx$
$T(q^{-1})$	polinômio de projeto, que substitui $C(q^{-1})$
$T$	matriz que contém os polinômios $T(q^{-1})$
$\approx$	
$G'_j(q^{-1})$	polinômio de grau $j-1$
$G'_j(q^{-1})$	matriz que contém os polinômios $G'_{i,j,k}(q^{-1})$ referentes a
$\approx$	cada função de transferência
$\Gamma_j(q^{-1})$	polinômio de grau $\max(n_b, n_c)$
$\Gamma_j(q^{-1})$	matriz que contém os polinômios $\Gamma_{i,j,k}(q^{-1})$ para cada
$\approx$	função de transferência
$N_1$	horizonte mínimo de predição
$N_2$	horizonte máximo de predição
$N_u$	horizonte de controle
$y^0$	vetor de predição em malha aberta
$\sim$	
$G'$	matriz de ordem $(n(N_2-N_1+1) \times n_{Nu})$ , que contém os
$\approx$	coeficientes $g'_i$
$g'_i$	coeficientes da resposta ao degrau
$w$	referência
$w$	trajetória de referência
$\sim$	

$\alpha$	parâmetro da trajetória de referência
$\alpha_i$	parâmetro $\alpha$ para cada malha de controle
$J$	critério de custo quadrático
$\lambda$	ponderação sobre a ação de controle
$\lambda$	matriz que contém as ponderações sobre as ações de controle
$\approx$	
$I$	matriz identidade
$\approx$	

## índices

$f$	sobrescrito que indica que a variável é filtrada por $1/T(q^{-1})$
$*$	sobrescrito que indica inclusão do parâmetro $\beta$

## VI – STGPC

$K(t)$	vetor de ganhos
$\sim$	
$P(t)$	matriz de covariância do erro nos parâmetros estimados
$\approx$	
$V(t)$	erros de estimação “a posteriori”
$V_o$	valor fixo para $V(t)$
$x^T$	vetor de dados
$\sim$	
$\theta(t)$	vetor de parâmetros
$\sim$	
$\hat{\theta}(t)$	vetor de estimativa de parâmetros
$\sim$	
$\hat{\phi}(t)$	saída do modelo predita pelas estimativas
$\varepsilon(t)$	erro de estimação
$d$	vetor de constantes correspondentes à resposta do estado estacionário para um vetor $u$ nulo

## CAPÍTULO I

### I.1 - Objetivos

O objetivo inicial deste trabalho foi desenvolver modelos dinâmicos de reatores catalíticos de leito fixo para aplicações em controle e otimização de processos em tempo real. Portanto, a primeira etapa do trabalho foi desenvolver modelos que reproduzissem as principais características dinâmicas do reator, que também fossem de fácil solução matemática e que exigissem pouco tempo computacional para a sua solução. A fim de atender essas exigências fez-se uso da modelagem pseudo-homogênea modificada que considera de maneira implícita a presença do sólido. De uma maneira geral os modelos heterogêneos requerem uma solução mais elaborada exigindo grandes tempos computacionais para a sua solução.

Na simulação do reator foi utilizado a equação da taxa da reação de oxidação catalítica do etanol a acetaldeído, pois trata-se de uma reação fortemente exotérmica e representativa de uma série de importantes reações de interesse industrial.

Inicialmente foram utilizados os modelos bidimensionais, sendo que os mesmos incorporam variações nas propriedades físicas, nos parâmetros de transferência de calor e massa, na temperatura de refrigeração e na pressão do reator, aspectos estes normalmente não considerados na literatura.

Com o objetivo de conseguir modelos ainda mais rápidos e confiáveis, aplicou-se diferentes técnicas de redução aos modelos bidimensionais gerando diferentes modelos reduzidos, os quais proporcionam uma boa concordância com os modelos bidimensionais, além de permitir uma vantagem significativa para aplicações em tempo real. Portanto, conseguiu-se desenvolver modelos, bi e unidimensionais, que satisfazem as exigências desejadas e que reproduzem um ambiente adequado para a avaliação do desempenho de diferentes algoritmos de controle e otimização.

De posse dos modelos, o objetivo final do trabalho foi o controle do reator, e para tanto utilizou-se de alguns dos diferentes tipos de algoritmos pertencentes as três principais famílias de controladores encontrados na literatura, clássica, preditiva e adaptativa, objetivando o estudo do desempenho dos mesmos frente ao difícil problema de controle do reator catalítico de leito fixo.

Os controladores estudados foram o clássico, PI, os preditivos, DMC e GPC, e o adaptativo preditivo, STGPC, e todos estes algoritmos foram avaliados tanto na forma monovariável, SISO, como multivariável, MIMO.

Concluída esta etapa do trabalho foi possível compreender melhor o sistema estudado, tanto em malha aberta como em malha fechada, resultando deste estudo importantes informações que possibilitam um melhor entendimento da modelagem e controle de reatores catalíticos de leito fixo.

## **I.2 – Organização do Trabalho**

O Capítulo II faz inicialmente uma abordagem sobre reatores catalíticos de leito fixo, e em seguida comenta-se os modelos encontrados na literatura e as simplificações dos modelos em geral utilizadas.

Quanto ao Capítulo III, apresentam-se os modelos, as taxas de reação utilizadas, os métodos numéricos utilizados, bem como as técnicas de redução de modelo estudadas. Já no Capítulo IV apresentam-se os resultados obtidos da simulação do comportamento do reator através da solução dos modelos no regime estacionário e dinâmico.

No Capítulo V fez-se um estudo dos efeitos dos parâmetros de operação no perfil axial da temperatura ao longo do reator através da técnica do planejamento fatorial. Este estudo conjuntamente com a análise do comportamento dinâmico do sistema no Capítulo IV, possibilitou a escolha apropriada dos pares de variáveis controlada/manipulada das malhas de controle apresentadas no Capítulo IV. Este conhecimento é necessário para a implementação eficaz dos algoritmos de controle.

Tendo o conhecimento do comportamento dinâmico do processo e dos efeitos dos parâmetros de operação, fez-se o estudo do processo em malha fechada, com a descrição dos algoritmos e os resultados apresentados no Capítulo VI. Os algoritmos clássico, PI, preditivos, DMC e GPC, e o adaptativo preditivo, STGPC, tanto na forma SISO como na MIMO foram avaliados, possibilitando um amplo entendimento do processo sob à ação de controle e qual algoritmo de controle é o mais indicado. No Capítulo VII são apresentadas as conclusões finais e sugestões para trabalhos futuros.



## CAPÍTULO II - REATOR CATALÍTICO DE LEITO FIXO

### II.1 - Introdução

Os reatores de leito fixo são equipamentos muito utilizados na indústria química, principalmente em reações catalíticas. O controle efetivo desses reatores é fundamental para se obter operações seguras, especialmente quando alto desempenho é desejado. Desta forma, deve-se conhecer muito bem o reator a ser controlado e para tanto, necessita-se de um modelo que descreva o seu comportamento da melhor maneira possível, sendo capaz inclusive de prever seu comportamento dinâmico. Por outro lado, as aplicações de um modelo dinâmico normalmente requerem um grande esforço computacional com impacto direto no tempo de processamento. Portanto, além do desenvolvimento de modelos com grande potencial de predição, tem-se que considerar a dificuldade na sua solução tanto em termos computacionais quanto na disponibilidade dos parâmetros necessários.

A simulação dinâmica de reatores químicos tem se expandido muito nos últimos anos. Estas simulações têm servido para vários propósitos: projeto de reatores, estratégias de partida e parada do reator, determinação de condições operacionais desejadas e de risco para o controle do processo, estudos de controle e otimização, etc. Para os três primeiros propósitos, deve-se usar modelos detalhados, muitas vezes heterogêneos, a fim de se obter resultados precisos do reator tanto qualitativamente como quantitativamente. Isto é, a precisão computacional deve ser mais enfatizada do que a velocidade computacional nestes casos. Para estudos de controle e otimização é viável ter-se modelos que possam ser resolvidos mais rápido e facilmente, que gerem respostas qualitativamente concordantes com o processo e que possam ser resolvidos em computadores de pequeno porte, Pirkle et al. (1987). Seguindo essa filosofia, neste trabalho foi utilizada a modelagem dinâmica pseudo-homogênea de reatores catalíticos de leito fixo monotubulares (leito fixo de partículas) para fins de estudo de controle e otimização “on-line” do mesmos.

A formulação dinâmica determinística de reatores de leito fixo consiste de equações diferenciais parciais para o balanço de massa, energia, “momentum” e da continuidade com apropriadas condições iniciais e de contorno. As variáveis independentes consistem de uma ou mais dimensões espaciais, dependendo da dimensionalidade do modelo, e o tempo. Além disso, os modelos utilizados neste trabalho incorporam a variação das propriedades físicas e sua influência na velocidade de escoamento e nos parâmetros de transferência. Adicionalmente é incorporada a variação

temporal da temperatura do fluido refrigerante avaliando de forma global a influência das variáveis operacionais no comportamento dinâmico do reator.

Reatores catalíticos de leito fixo exibem complicado comportamento estacionário e dinâmico resultante das não-linearidades do sistema e da diferença de capacidades térmicas do sólido e do fluido, as quais entre outras coisas levam ao surgimento da resposta inversa e “runaway” da temperatura do reator. Sem um modelo detalhado não é possível fazer previsões confiáveis porque a localização das regiões com comportamento instável mudam no tempo e espaço e são dependentes das perturbações da entrada e das ações de controle, McGreavy e Maciel Filho (1989).

Modelos confiáveis, dependem do conhecimento de como os mecanismos físico-químicos e fatores externos afetam o desempenho geral do sistema. Entretanto, quando aplicações “on-line” são requeridas modelos simplificados tem que ser usados. O problema é obter um modelo representativo o qual mantenha as características essenciais do sistema. Levando-se isto em consideração, neste trabalho foram propostos modelos bi e unidimensionais baseados na aproximação pseudo-homogênea. Começando com um modelo bidimensional e aplicando técnicas de redução, os modelos unidimensionais foram desenvolvidos. Os modelos bidimensionais foram baseados nos modelos desenvolvidos por Jutan et al. (1977) e Maciel Filho (1989) os quais incorporam as capacidades térmicas do fluido e do sólido,  $(\rho C_p)_f$  e  $(\rho C_p)_s$  respectivamente.

Para simulação do reator utilizou-se da reação de oxidação do etanol a acetaldeído, sendo esta reação altamente exotérmica e com uma cinética muito complexa o que torna o processo extremamente interessante do ponto de vista de simulação e controle. Duas taxas de reação foram estudadas, uma utilizando o catalisador de cobre oxidado, Moura (1984) e outra o catalisador de Fe-Mo, Maciel Filho (1985) e Domingues (1992).

Para ambos os modelos, bi e unidimensionais, estudos sobre o comportamento dinâmico, análise de sensibilidade e controle foram realizados. Já para o comportamento estacionário, utilizou-se apenas o modelo bidimensional, pois o objetivo da formulação unidimensional é economizar o tempo computacional visando a simulação dinâmica do reator.

Com os modelos do reator desenvolvidos, fez-se uso destes para o estudo do controle. Para este estudo, algoritmos de diversas características foram avaliados no sentido de absorver perturbações nos parâmetros operacionais que alteram o comportamento dinâmico do reator como também alterar o ponto de operação do mesmo, mudanças de “setpoint”. Os algoritmos de controle avaliados foram o clássico, PI, os preditivos de longo alcance, DMC e GPC, e o adaptativo preditivo, STGPC.

O algoritmo clássico foi escolhido devido ao seu grande emprego e por ser esta ainda a referência com a qual deve ser comparado qualquer controlador, Toledo (1992). No caso dos algoritmos preditivos e adaptativos, estes são indicados para sistemas não-lineares, variantes ao longo do tempo e com restrições operacionais nas variáveis do processo, e dentre os algoritmos preditivos, o DMC e o GPC foram escolhidos pela sua robutez, flexibilidade de ajuste devido à presença de vários parâmetros e indicações sugeridas na literatura. Com relação ao algoritmo adaptativo, o GPC foi estendido à forma adaptativa, STGPC, através do acoplamento da técnica de identificação “on-line” dos mínimos quadrados recursivos, “RLS”, com fator de esquecimento variável escalar, Toledo (1992), Toledo e Maciel Filho (1997a, 1997b, 1998b, 1998d).

Ambos os algoritmos foram avaliados tanto na forma monovariável, SISO, como na forma multivariável, MIMO. Portanto, explora-se assim um conjunto bem razoável de algoritmos de controle, permitindo obter uma maior compreensão sobre a natureza e as principais características do sistema estudado sob a ação do controle. Assim, através do estudo do comportamento estacionário e dinâmico conjuntamente com o estudo do controle do reator efetuados neste trabalho obtêm-se informações importantes e necessárias para o desenvolvimento de um modelo confiável para o controle do reator, além do algoritmo de controle mais indicado para este processo.

Também deve-se ressaltar que apesar do trabalho ter sido desenvolvido para um processo específico, os procedimentos e os modelos utilizados são obviamente de uso geral para outra reação de interesse. A seguir são apresentadas as informações sobre os trabalhos publicados na área de modelagem de reatores catalíticos de leito fixo que foram consideradas importantes para a realização deste trabalho.

## II.2 - Reatores Catalíticos

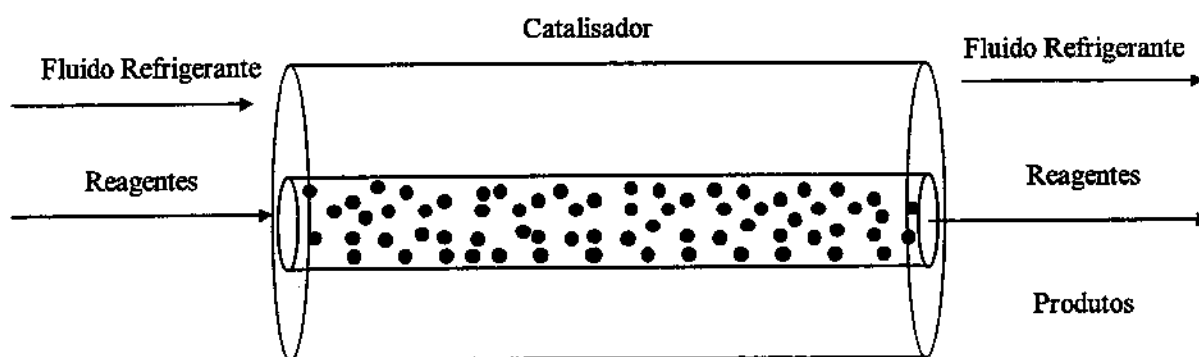


Figura II.1 - Esquema Geral de um Reator Catalítico de Leito Fixo

Desde a descoberta e a aplicação dos catalisadores sólidos aos processos químicos no começo deste século, a indústria química se diversificou e cresceu de forma espetacular. Isto se deu através do desenvolvimento de novos processos e da atualização de processos existentes, muitos deles baseados no uso de catalisadores sólidos. A maior parte destes processos catalíticos envolvendo reagentes gasosos emprega reatores de leito fixo, Froment e Bichoff (1990). Importantes exceções, para as quais a operação em leito fluidizado é preferida, seja para regenerar continuamente o catalisador seja para melhorar a remoção de calor, são o craqueamento catalítico do “gas-oil”, as sínteses da acrilonitrila e do dicloreto de etileno, e a oxidação do naftaleno a anidrido ftálico, Froment e Hofmann (1987).

Na forma mais básica, um reator de leito fixo consiste em um tubo cilíndrico preenchido de forma compacta e imóvel por partículas de catalisador e o reagente em fase gasosa escoia através deste meio poroso, mostrado esquematicamente na Figura II.1. Este reator pode ser considerado como o cavalo de batalha da indústria química, devido ao número de reatores deste tipo nela empregados, e ao valor econômico dos materiais por eles produzidos, Hill (1977). Isto é verdade mesmo nos dias atuais.

Reatores de leito fixo podem ter a escala ampliada (“scale-up”) de várias maneiras. A teoria da similaridade é de pouco uso nesta matéria. É prática geral proceder da escala de laboratório à escala comercial gradualmente, envolvendo ao menos duas escalas intermediárias: a unidade piloto e a unidade demonstração. Mesmo com grandes pilotos não se pode esperar obter exatamente o mesmo comportamento do reator, e assim algumas vezes uma análise mais detalhada é necessária. Atualmente, em função do desenvolvimento da informática e da existência e disponibilidade de simuladores industriais ou da possibilidade de serem desenvolvidos, é inconcebível ampliar a escala de reatores sem ao menos um certo grau de modelagem. O modelo pode ser fundamental e baseado em informações separadas dos vários aspectos do processo, amarradas e fundidas num conjunto de equações simulando o reator, ou pode ser semi-empírico, baseando-se assim em experimentação piloto para ajuste dos chamados “parâmetros efetivos do modelo”, Froment e Hofmann (1987).

O reator de leito fixo tem muitas vantagens únicas e valorizáveis em relação a outros tipos de configurações. Simplicidade, com conseqüente baixo custo de construção e manutenção, pouca necessidade de equipamentos auxiliares, graças justamente à fixação das partículas no leito, o que não exige unidades custosas de separação a jusante, e larga flexibilidade de operação figuram entre estas vantagens. Para reações ocorrendo em condições de

temperatura extremamente altas ou altas pressões e empregando catalisadores sólidos, as considerações econômicas usualmente impõem que o processo somente se torne rentável quando um reator de leito fixo for empregado, Hill (1977).

As dificuldades usualmente relacionadas com o emprego de reatores de leito fixo referem-se principalmente à transferência de calor. Isto se deve ao fato de que a taxa de liberação de energia ao longo do comprimento do reator não é uniforme e a maior parte da reação normalmente ocorre nas proximidades da entrada do reator. Em reações exotérmicas a taxa de reação pode ser relativamente maior à entrada do reator devido a maior concentração dos reagentes. Em reatores não adiabáticos com reações exotérmicas a temperatura no eixo do leito pode ser muito diferente do que ocorre na parede, o que tende a aumentar a taxa de reação local e reforçar cada vez mais esta diferença até o esgotamento local dos reagentes. Artifícios para superar estas dificuldades são conhecidos, um deles é o emprego de reatores multitubulares, tal como utilizado por McGreavy e Maciel Filho (1988), sendo apenas uma das formas de modificar apropriadamente a condição física do leito. Também o uso de diluentes inertes na alimentação, assim como a diluição do catalisador com material sólido inerte, permite reduzir os efeitos térmicos da reação. O controle da temperatura do refrigerante externo e a divisão do leito em seções independentes permitem também controlar finamente a temperatura interna do reator, Domingues (1992), Maciel Filho e Domingues (1992). Independentemente do projeto mecânico do reator, a operação do reator em altos níveis de desempenho requerem a utilização de estratégias de controle com controladores adequados.

Os reatores de leito fixo atuais são em grande parte equipamentos de grande capacidade. Houve um aumento espetacular da capacidade destes reatores nas ultimas décadas, aumento que evidentemente refletiu um crescimento de demanda do mercado, mas que indubitavelmente traduziu o progresso nas áreas tecnológica e fundamental. O arrefecimento do incremento de capacidade observado nos anos 80 se deveu muito mais à saturação dos mercados e à construção de novas unidades de reprodução nos países em desenvolvimento, do que às limitações da capacidade de análise destes equipamentos, devidas a aspectos tecnológicos ou fundamentais, Fromennt e Bischof (1990). Atualmente se incrementa o uso deste tipo de reator também para unidades de pequeno porte.

Fromennt e Bischoff (1990) mencionam os progressos que se pode esperar dos reatores de leito fixo para os próximos anos:

- o desenvolvimento de novos catalisadores e modificação dos existentes;

- avanços nos dados fundamentais, nos dados físico-químicos, nos parâmetros de transporte no leito fixo, principalmente para transferência de calor;
- conscientização das grandes empresas para a importância dos dados cinéticos confiáveis como base para projeto seguro dos reatores. Os estudos cinéticos tem-se beneficiado com a sistematização dos métodos de planejamento de experimentos, e com métodos cada vez mais poderosos para a análise de dados;
- uso de modelos matemáticos, especialmente determinísticos, de reatores de leito fixo como base para o seu projeto. A modelagem dos reatores tem se beneficiado com o progresso dos métodos numéricos e com o aperfeiçoamento dos modelos matemáticos decorrente deste progresso.

Com relação a sofisticação dos modelos, o desenvolvimento nos últimos anos da Engenharia das Reações Químicas como disciplina reconhecida, e as possibilidades crescentes dos computadores, tem conduzido os pesquisadores à exploração extensiva do projeto e do desempenho dos reatores tanto no regime estacionário quanto no dinâmico. A análise e o projeto dos reatores tem gerado problemas com a escolha do grau de sofisticação dos modelos, sendo que este depende em primeiro lugar do processo, ou seja, do esquema reacional, da sua sensibilidade às perturbações nas condições de operação e em igual importância está o grau de precisão com que se conhecem os dados cinéticos e os parâmetros de transporte. Finalmente há que se considerar o benefício econômico em jogo. Portanto, pode-se esperar para o futuro, o uso crescente de reatores de leito fixo na indústria sobretudo devido à (Domingues, 1992):

- o incremento do conhecimento dos dados fundamentais que se tem assistido nos últimos anos;
- o aumento da preditividade na obtenção dos parâmetros de transporte de massa e de calor que se tem verificado através do grande número de trabalhos publicados;
- a melhoria na sistematização da coleta de dados experimentais;
- a robustez, desempenho e adequação crescentes dos métodos de análise de dados e métodos de solução numérica de sistemas de equações diferenciais;
- a facilidade de acesso aos computadores de alto desempenho cujo preço continua a cair tão vertiginosamente quanto cresce sua velocidade;
- redução do custo físico dos reatores, integração destes com o processo à jusante e montante, resultando em economia tanto de despesas fixas como

das despesas proporcionais, segurança de operação, qualidade dos produtos assegurada pelo bom desempenho do sistema de controle destes equipamentos, segurança operacional, etc.

Também deve-se enfatizar que as principais deficiências na modelagem dos processos catalíticos com reatores de leito fixo se originam de cinéticas químicas incompletas ou imprecisas, o que é insuficientemente reconhecido pelos engenheiros químicos. Assim, uma resposta eficaz à necessidade crescente de bem modelar é a exigência de qualidade nos estudos cinéticos, condição principal para o sucesso dos estudos subsequentes, Froment e Hofmann (1987).

Mais informações sobre reatores catalíticos de leito fixo podem ser obtidas nas referências a seguir, que estão apresentadas em ordem cronológica: Bird (1960), Aris (1965), Amundson (1966), Himmeblau e Bischoff (1968), Aris e Amundson (1973), Finlayson (1974), Carbery e But (1974), Karanth e Hughes (1974), Aris (1975a), Aris (1975b), Cabery (1976), Hill (1977), Lapidus e Amundson (1977), Pereira et al. (1979), Holland e Anthony (1979), Biscaia Jr. (1980), Lima (1981), Incropera e Witt (1981), Varma (1981), McGreavy (1983), Levenspiel (1983a), Levenspiel (1983b), Westerterp et al. (1984), Duarte e Lemcoff (1984), Doraiswamy e Sharma (1984), Moura (1984), Maciel Filho (1985), Froment (1986), Fogler (1986), Froment e Hofmann (1987), Khanna e Seinfeld (1987), Villadsen e Michelsen (1987), Figueiredo e Ribeiro (1987), Nauman (1987), Levenspiel (1989), Jorgensen e Jensen (1989), Maciel Filho (1989), Maciel Filho (1990), Azevedo et al. (1990), Luyben (1990), Santos (1990), Froment e Bischoff (1990), Lucena (1991), Luize (1991), Domingues (1992), Maciel Filho (1993), Tresmondi (1995), Azeredo (1996) e Cremasco (1998).

Pode-se notar, ao se consultar estas obras, como já mencionado, os avanços no tratamento dado à modelagem matemática dos reatores de leito fixo. A seguir são apresentadas as possíveis classificações dos modelos destes reatores dependendo da abordagem a ser considerada, tomando-se como base as referências citadas.

### **II.3 - Modelos Matemáticos**

Modelos matemáticos de reatores de leito fixo são necessários para a descrição do comportamento estacionário e dinâmico para fins de estudo de projeto, otimização e controle do processo. Embora insuficientes detalhes podem levar a um modelo incapaz de representar precisamente a resposta do

reator à mudanças nas variáveis de operação, excessivo detalhamento pode levar à modelos que são computacionalmente impraticáveis e/ou contém parâmetros cujos valores não podem ser determinados precisamente pelos dados de operação. Portanto, o tipo de modelo e seu nível de complexidade na representação do sistema depende do uso para o qual o modelo será desenvolvido, Khanna e Seinfeld (1987).

Os desenvolvimentos fundamentais e aplicações relativos à modelagem e operação de reatores catalíticos de leito fixo são interdisciplinares por natureza, e assumem um conhecimento dos princípios da termodinâmica, catálise, cinética química e fenômeno de transporte, bem como um domínio tanto da teoria e prática, as quais levam ao desenvolvimento e simplificação da estratégia ótima de operação. O conceito de modelagem do reator tem sido empregado por diferentes pesquisadores para diferentes propósitos. Entretanto, é possível reconhecer a existência de uma certa metodologia para a classificação dos modelos que pode ser geralmente aplicada e a qual, conseqüentemente, pode ser utilizada também para reatores catalíticos de leito fixo. No trabalho de Azevedo et al. (1990) sugere-se uma classificação simples a qual distingue entre modelos “preditivos” e “de aprendizagem”, onde os modelos preditivos são mais de uso industrial e são empregados para determinar:

- o “scale-up” do piloto para a escala final da planta;
- o estudo de comportamento de novas alimentações e novos catalisadores;
- a predição de efeitos de diferentes regimes de operação no rendimento do reator;
- a análise de tendência dinâmica para propósitos de controle;
- a otimização das condições de operação.

Na modelagem dos reatores catalíticos de leito fixo é geralmente feito uso de estruturas com um caráter determinístico, tal qual os modelos clássicos “Fickianos”, um conveniente nome geral para estes modelos baseados nas leis de Fick e Fourier para dispersão de massa e calor, respectivamente, tão amplamente discutidos na literatura. Ambos os tipos incluem informações obtidas pela aplicação de princípios físico-químicos na intenção de representar o verdadeiro processo. O modelo preditivo é caracterizado como sendo tão simples, quanto possível, contendo um mínimo de informação necessária, envolvendo a estimação de tão poucos parâmetros quanto possível e, muito importante, requerendo um aceitável tempo de computação para sua solução. No caso dos modelos de aprendizagem o tempo de computação não é o principal fator, e suas características podem ser sumarizadas como:



- prover uma relação estrutural entre parâmetros os quais são características dos mais elementares mecanismos;
- ajudar o entendimento dos modelos mais simples pela indicação de suas relações com os modelos mais complexos;
- prover um procedimento de diagnóstico para determinar as causas elementares de comportamentos inesperados do sistema;
- prover um caminho para experimentação pela sugestão de qual parâmetro domina na predição do comportamento do reator;
- prover um melhor entendimento do sistema o qual pode levar à novos desenvolvimentos e/ou melhoramentos no processo e no seu projeto.

Um agrupamento também interessante dos modelos usados para descrever o comportamento do reator é dado por Doraiswamy e Sharma (1984) dentro das seguintes categorias:

- Contínuos;
- Célula de Mistura;
- Canal;
- Fluxo Cruzado.

Os modelos contínuos são os modelos do tipo “Fickianos” descritos anteriormente, os quais são classificados entre modelos pseudo-homogêneos e heterogêneos. Duas outras classes diferentes são os modelos de célula de mistura e canal, os quais foram propostos como alternativas aos modelos contínuos. No modelo de célula, cada partícula de catalisador ao longo com seu ambiente é considerado um pequeno reator. Uma sequência de tais células conectadas na direção do fluxo e/ou lateralmente é assumido representar os modelos heterogêneos. O chamado modelo de canais é baseado na observada distribuição de volumes locais de vazios no leito. O volume de vazio passa através de zonas alternadas de máxima e mínima na direção axial. O modelo de canais na sua forma mais simples assume que o leito é composto de um conjunto de superfícies cilíndricas coaxiais passando através de regiões de mínimo vazio. Mais recentemente, o modelo de fluxo cruzado foi proposto, o qual divide o fluido em zonas estagnadas e fluídas, com troca entre as mesmas.

O enfoque do presente trabalho foi a utilização dos modelos contínuos devido a concordante reprodução do comportamento dinâmico dos reatores

catalíticos de leito fixo e as inúmeras correlações para parâmetros de transferência baseados nestes modelos.

A Figura II.2 a seguir mostra os problemas a serem enfrentados na modelagem e projeto dos reatores catalíticos de leito fixo, relacionando os aspectos em microescala e macroescala. Para estabelecer uma melhor noção entre os modelos, estes são classificados em duas amplas categorias, pseudo-homogêneos e heterogêneos. Modelos pseudo-homogêneos não consideram explicitamente a presença de catalisador, em contraste com modelos heterogêneos, os quais apresentam equações de conservação para o fluido e catalisador. Existem ainda abordagens pseudo-homogêneas modificadas, as quais incluem implicitamente a presença do sólido.

Escala	Abordagem	Consideração
Microescala	Sítio Catalítico	Cinética da Reação
	Partícula	Interfacial $\Delta C$ , $\Delta T$ ?
	Catalítica	Intraparticular $\Delta C$ , $\Delta T$ ?
Macroescala	Reator	Tipos de transferência de calor e massa convectivas
		Plug flow + dispersão radial ou axial? Velocidade não uniforme + dispersão radial?

Figura II.2 - Aspectos Tratados na Modelagem de um Reator Catalítico de Leito Fixo

Dentre cada categoria os modelos são classificados em ordem de crescimento de complexidade, conforme mostra a Figura II.3 proposta por Froment e Hofmann (1987) a seguir.

O modelo básico AI, postula escoamento “plug flow” através do leito, e é unidimensional por assumir uniformidade na seção perpendicular ao fluxo, exceto a uma camada fina próxima à parede, onde calor é trocado com a vizinhança. A primeira complicação, levando ao modelo AII, é a consideração para desviar do “plug flow” pela super-imposição da dispersão na direção axial.

Quando dispersão também é considerada na direção radial, por causa da ocorrência de gradientes de concentração e temperatura, o modelo torna-se bidimensional, modelo AIII.

O primeiro modelo da categoria heterogênea, BI, é derivado do modelo básico pseudo-homogêneo, AI, pela consideração de gradientes de temperatura e concentração sobre o filme cercando as partículas de catalisador. O segundo modelo, BII, ainda unidimensional, adiciona gradientes dentro da partícula de catalisador ao modelo anterior. Finalmente, o modelo BIII considera gradientes axial e radial no reator como também gradientes locais entre e intra partículas.

Os parâmetros de dispersão mássica utilizados são efetivos, os quais possibilitam simplificação do modelo e facilidade relativa na determinação de correlações para os parâmetros envolvidos. Para as situações não isotérmicas, a transferência de calor é incluída no modelo. No modelo básico pseudo-homogêneo, AI, calor é considerado ser somente transferido por convecção global. Quando dispersão axial e/ou radial é adicionada, resultando nos modelos AII e AIII, o calor é também transferido por condução efetiva. Nos modelos heterogêneos, a transferência de calor e massa do meio fluido para superfície do catalisador é descrita em termos de mecanismos convectivos. Mecanismos de transporte dentro da partícula são expressos em termos de difusão e condução efetiva, com apropriadas difusividade e condutividade efetivas. No modelo BIII a dispersão no leito é considerada por um caminho análogo ao usado no equivalente modelo pseudo-homogêneo, AIII, mas os mecanismos são separados dentro deste ocorrendo na fase fluida e sólida, respectivamente, Froment e Hofmann (1987).

Pseudo-Homogêneos		Heterogêneos	
T = Tsólido,C = Csólido		T ≠ Tsólido; C ≠ Csólido	
Uni-Dimensional			
AI	<u>Básico, Ideal</u> →	BI	+ Gradientes Interfaciais
AII	+ Dispersão Axial	BII	+ Gradientes Intraparticular
Bi-Dimensional			
AIII ↓	+ Dispersão Radial	BIII ↓	+ Dispersão Radial

Figura II.3 - Classificação dos Modelos para um Reator Catalítico de Leito Fixo

Baseado no conhecimento da utilização de modelos contínuos com parâmetros de transferência efetivos, o nível de descrição físico-químico do sistema pelos modelos é do tipo Gradiente-Múltiplo, segundo classificação baseada em Himmeblau e Bischoff (1968).

A título de mais informação consultar as seguintes referências: Himmeblau e Bischoff (1968), Aris (1975a), Aris (1975b), Lapidus e Amundson (1977), Lerou e Froment (1977), Biscaia Jr. (1980), Westerterp et al. (1984), Doraiswamy e Sharma (1984), Baiker e Bergougnan (1985), Fogler (1986), Touzani et al. (1987), MacGreavy e Ikponmwosa (1988), Levenspiel (1989), Maciel Filho (1989), MacGreavy e Maciel Filho (1989), Froment e Bischoff (1990), Luyben (1990), Quinta Ferreira (1992), Domingues (1992), Maciel Filho (1993), Ogunnaike e Ray (1994), Toledo (1994) e Toledo (1997).

## II.4 – Simplificações dos Modelos Matemáticos

Devido às complexidades da descrição matemática dos modelos mais sofisticados para reatores catalíticos de leito fixo e complicações decorrentes com a solução numérica, o uso de simplificações na modelagem física são importantes. Estas simplificações visam além de reduzir a estrutura das equações diferenciais, diminuir o tempo computacional necessário para simulação de estado estacionário/dinâmico do sistema com o intuito da utilização do modelo para estudos de otimização e controle. As simplificações devem ser avaliadas para cada sistema em particular a fim de não comprometerem o comportamento geral do modelo.

Diretrizes pragmáticas para tais simplificações são, Azevedo et al. (1990):

- o modelo não deve ser mais detalhado do que absolutamente necessário para o propósito particular envolvido;
- o modelo deve conter tão poucos parâmetros quanto possível;
- correlações confiáveis devem existir para os parâmetros do modelo selecionado;
- o esforço matemático/computacional requerido para a solução do modelo deve ser razoável.

Algumas das simplificações comumente aceitas são, Azevedo et al. (1990), Khanna e Seinfeld (1987):

1. pressão constante no reator;
2. condutividade térmica da partícula constante;
3. valores médios constantes para propriedades físicas e de transporte;
4. perfil de temperatura de entrada plano;
5. temperatura de refrigeração constante;
6. porosidade do leito constante;
7. perfil de velocidade radial plano;
8. atividade catalítica constante;
9. negligenciar dispersão axial mássica e térmica;
10. estado quasi-estacionário para a concentração;
11. negligenciar o termo de acúmulo de energia para a fase fluída;
12. isothermicidade interna da partícula catalítica;
13. propriedades do gás são função da temperatura, pressão e número de moles total como ditado pela lei do gás ideal;
14. utilização do fator de efetividade.

Suposições (1), (2) e (3) são empregadas em muitos casos. Entretanto, variações na pressão, condutividade térmica da partícula e propriedades físicas e de transporte são relativamente fáceis de incluir se o modelo está sendo resolvido numericamente. O grau de dificuldade de tais implementações varia com a técnica numérica específica adotada.

Porosidade constante do leito e escoamento “plug flow” são utilizados frequentemente, embora vários pesquisadores tenham considerado variações das mesmas. Com relação ao caso (8), se mudanças na atividade catalítica são levadas em consideração, um modelo apropriado de desativação tem que ser encontrado e ajustado para o caso particular envolvido.

No caso (9), em geral difusão axial de massa e energia tem sido negligenciadas em muitos estudos de reatores catalíticos de leito fixo. Isto é feito através de critérios desenvolvidos pelo conhecimento teórico/prático que indicam quando a dispersão axial é desprezível em face de outros fenômenos.

O estado quasi-estacionário, (10), para o balanço de massa é justificado por que qualquer resposta transiente de transporte de massa é cerca de três ordens de magnitude menor do que o observado para o transporte térmico. Outra potencial simplificação envolve assumir negligenciável o acúmulo de energia na fase gasosa quando comparada à fase sólida, a qual pode ser avaliada pela seguinte relação:

$$\text{Relação} = \frac{(\rho C_p)_g \varepsilon}{(\rho C_p)_s (1 - \varepsilon)}$$

A consideração de isotermicidade interna da partícula catalítica, (12), é geralmente aceita para a maioria das reações catalíticas gás-sólido, Pereira et al. (1979), McGreavy e Maciel Filho (1989), Maciel Filho (1989) e Maciel Filho (1993).

Com relação a utilização da lei do gás ideal, (13), esta é uma prática muito comum, sem maiores detalhes, e quanto à utilização do fator de efetividade, (14), este pode reduzir muito a complexidade em relação ao tratamento reação/difusão à nível de partícula.

Concluindo, estas são algumas das simplificações feitas, ressaltando que estas devem ser avaliadas para cada sistema em particular para saber de sua utilidade.

## II.5 – Conclusões

Procurou-se ao longo deste capítulo comentar os principais tópicos referentes a modelagem e simulação dos reatores catalíticos de leito fixo visando direcionar o leitor para os propósitos dos estudos realizados neste trabalho. Pode-se concluir que o tipo de modelo a ser utilizado e as simplificações empregadas para representar o comportamento dinâmico/estacionário de um reator catalítico de leito fixo vão depender basicamente dos objetivos almejados e dos dados cinéticos e parâmetros de transferência de calor e massa disponíveis ao usuário. Com relação aos tópicos relacionados ao controle dos reatores catalíticos de leito fixo, estes serão apresentados no Capítulo VI.

## **CAPÍTULO III – MODELOS DESENVOLVIDOS**

### **III.1 - Introdução**

No Capítulo II foram discutidas questões relevantes sobre reatores catalíticos de leito fixo inclusive a modelagem e os aspectos envolvidos na escolha do modelo adequado. Neste capítulo serão apresentadas as taxas de reação de oxidação do etanol a acetaldeído utilizadas, os modelos pseudo-homogêneos bi e unidimensionais estudados, os métodos numéricos e as técnicas de redução aplicadas; ficando para o próximo capítulo os resultados do comportamento estacionário/dinâmico dos modelos apresentados.

### **III.2 – Reação de Oxidação Catalítica do Etanol a Acetaldeído**

Atualmente, o acetaldeído constitui um importante componente em muitos processos químicos, principalmente para a produção de acetona via ácido acético. Convencionalmente, o acetaldeído vem sendo produzido pela via petroquímica, utilizando-se como catalisador telas de prata e de suas ligas. No entanto, além do alto custo a prata exige temperaturas de 500 a 570° C e apresenta rendimentos inferiores a 95% em acetaldeído e conversões nunca superiores a 75%, Tresmondi (1995).

Na busca de processos alternativos, Moura (1984) utilizou um catalisador de cobre oxidado para a obtenção do acetaldeído via oxidação do etanol. Seguindo a mesma linha, Maciel Filho (1985), utilizou o catalisador de Ferro-Molibdênio, obtendo resultados bastante favoráveis relativamente à estabilidade, atividade e seletividade do catalisador. Para o catalisador de cobre foram necessárias temperaturas entre 300 e 400° C, enquanto para o catalisador de Fe-Mo trabalhou-se à temperaturas relativamente baixas, entre 180 e 240° C, obtendo-se altas conversões e seletividade total.

Nesta linha de pesquisa, Domingues (1992) e Maciel Filho e Domingues (1992) estudaram aspectos de projeto para reatores de leito fixo monotubulares e multitubulares e, face aos resultados de seletividade e conversão obtidos, constataram a viabilidade técnico-econômica da produção do acetaldeído a partir da oxidação catalítica do etanol sobre Fe-Mo. Continuando, Tresmondi (1995) fez um estudo para a estimativa de parâmetros cinéticos e de transferência de calor em reatores de leito fixo, Azeredo (1996) desenvolveu um “software” para estudo do comportamento dinâmico de reatores de leito fixo, embora o tempo computacional necessário para a solução do modelo foi proibitivo para aplicações em tempo real, e mais recentemente Stinghen (1998) promoveu estudos da aplicação de diferentes



técnicas de otimização no reator catalítico de leito fixo para obtenção da operação ótima do sistema em regime estacionário. Estes trabalhos apontam para o grande potencial deste processo para possíveis aplicações industriais além de mostrarem ser este sistema interessante para o estudo de simulação, controle e otimização de processos, uma vez que trata-se de uma reação exotérmica típica de muitos sistemas industriais importantes.

Neste trabalho, o enfoque foi dado para o desenvolvimento e avaliação do desempenho do comportamento dinâmico de diferentes modelos, bi e unidimensionais, objetivando a aplicação dos mesmos para controle em tempo real. Portanto, afim de melhor compreender o processo da oxidação do etanol a acetaldeído em malha aberta e fechada fez-se uso das duas cinéticas, Moura (1984) e Maciel Filho (1985), para os estudos da simulação do comportamento estacionário/dinâmico do reator.

### III.2.1 – Equação da Taxa de Reação com Catalisador de Fe-Mo

Na dedução da equação da taxa de reação, o mecanismo de Temkin foi usado para interpretar os dados experimentais. Este mecanismo considera a reação catalítica heterogênea em sua complexidade, incluindo reações intermediárias e reações de quimisorção entre gases e a superfície do catalisador, Azeredo (1996). O mecanismo considera duas rotas, sendo que uma representa a reação química do etanol ao acetaldeído e a outra é uma rota vazia.

Maciel Filho (1985) obteve a seguinte equação da taxa de reação:

$$R_{w1} = \frac{(R + 1) 2K_1 K_2 P_{O_2} P_{ET}}{K_3 K_1 P_{ET} P_{AC} + K_1 P_{ET} + 2K_2 P_{O_2} + K_3 K_4 P_{AC} P_{H_2O}} \quad (III.1)$$

$$P_{N_2} = \frac{0.79 R P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (III.2)$$

$$P_{O_2} = \frac{(0.21 R - 0.5 X) P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (III.3)$$

$$P_{H_2O} = \frac{X P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (III.4)$$

$$P_{ET} = \frac{(1 - X) P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (III.5)$$

$$P_{AC} = \frac{X P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (III.6)$$

onde  $P_{N_2}$ ,  $P_{O_2}$ ,  $P_{ET}$ ,  $P_{H_2O}$ ,  $P_{AC}$  são pressões parciais do nitrogênio, oxigênio, etanol, água e acetaldeído respectivamente,  $P$  a pressão do reator,  $K_i$  constantes cinéticas na forma de Arrhenius,  $X$  a conversão do etanol,  $R$  a relação molar na alimentação de ar/etanol e  $R_{W1}$  está expresso nas unidades de (Nl/min.gcat).

Maiores detalhes sobre o desenvolvimento das expressões das pressões parciais são apresentados no Apêndice I.

### III.2.2 – Equação da Taxa de Reação com Catalisador de Cobre Oxidado

O procedimento e considerações adotados em Maciel Filho (1985) foram os mesmos empregados em Moura (1984). O mecanismo considera três rotas, a primeira representa a reação do etanol a acetaldeído, a segunda a reação do etanol a gás carbônico e a última é uma rota vazia. Moura (1984) obteve a seguinte equação da taxa de reação para o catalisador de cobre oxidado:

$$R_{W2} = \frac{(R + 1) 2K_1 K_2 P_{O_2} P_{ET}}{K_3 K_1 P_{ET} P_{AC} + K_1 P_{ET} + 2K_2 P_{O_2} + K_3 K_4 P_{AC} P_{H_2O}} \quad (III.7)$$

$$P_{N_2} = \frac{0.79 R P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (III.8)$$

$$P_{O_2} = \frac{(0.21 R - 3 X + 2.5 X \Phi) P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (III.9)$$

$$P_{H_2O} = \frac{(3 X - 2 X \Phi) P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (III.10)$$

$$P_{ET} = \frac{(1 - X) P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (III.11)$$

$$P_{AC} = \frac{X \Phi P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (\text{III.12})$$

$$P_{CO2} = \frac{2 X (1 - \Phi) P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (\text{III.13})$$

onde  $P_{N2}$ ,  $P_{O2}$ ,  $P_{ET}$ ,  $P_{H2O}$ ,  $P_{AC}$ ,  $P_{CO2}$  são pressões parciais do nitrogênio, oxigênio, etanol, água, acetaldeído e gás carbônico respectivamente,  $P$  a pressão do reator,  $K_i$  constantes cinéticas na forma de Arrhenius,  $X$  a conversão total do etanol,  $R$  a relação molar na alimentação de ar/etanol,  $\Phi$  rendimento global e  $R_{W2}$  está expresso nas unidades de (kmol/m<sup>2</sup>.h).

Mais detalhes sobre o desenvolvimento das expressões das pressões parciais consultar o Apêndice II.

### III.3 – Modelos Bidimensionais

A modelagem de reatores tubulares de leito fixo tem sido largamente estudada, apresentando-se modelos com diferentes níveis de sofisticação, capazes de fornecer respostas suficientemente precisas com relação aos fenômenos observados experimentalmente.

Os modelos para o reator catalítico de leito fixo podem ser agrupados em pseudo-homogêneo ou heterogêneo, de acordo como é tratado o meio formado pelas partículas de catalisador e mistura reagente.

Quanto aos modelos heterogêneos, Froment e Bischoff (1990) afirmam que pode ser necessário, para reações muito rápidas com importante efeitos térmicos, distinguir entre as condições de temperatura e composição no fluido e na superfície da partícula do catalisador, e até mesmo das condições dentro da partícula. No entanto, estes modelos necessitam de elevados tempos computacionais para sua solução numérica, o que os tornam proibitivos para o uso em aplicações em tempo real.

Nos modelos pseudo-homogêneo, os estudados neste trabalho, as partículas de catalisador e fluido reagente são tratados como um único meio contínuo. Assume-se que o fluido dentro de um elemento de volume associado a uma partícula de catalisador pode ser caracterizado por uma certa temperatura, pressão e composição, e estas grandezas variam continuamente com a posição dentro do reator, Hill (1977). Modelos específicos para aplicações em tempo real.

Com relação ao nível de sofisticação do modelo, este deve estar diretamente ligado às características do processo, esquema reacional e sensibilidade à perturbações nas condições de operação por exemplo, e dos objetivos almejados. Um procedimento geral para a escolha de um modelo pode ser resumido da seguinte maneira, Azevedo et al. (1990):

1. o modelo não deve ser mais detalhado do que o absolutamente necessário para o propósito particular envolvido;
2. o modelo deve conter tão poucos parâmetros quanto possível;
3. correlações confiáveis devem existir para os parâmetros do modelo selecionado;
4. esforço matemático/computacional requerido para a solução do modelo deve ser razoável.

O item (4) merece especial atenção em aplicações de controle e otimização, onde as equações do modelo devem ser resolvidas várias vezes, e o tempo adicional necessário para um modelo mais complicado, pode tornar-se significativamente expensivo, sem grandes ganhos para a representabilidade do reator.

Como o objetivo deste trabalho foi desenvolver modelos para aplicação em controle em tempo real, os modelos estudados foram os pseudo-homogêneos, de diferentes características, os quais reproduzem de maneira rápida e fácil o comportamento dinâmico do reator. Estes objetivos são muito difíceis de serem atingidos utilizando modelos heterogêneos.

A intenção no estudo de diferentes modelos pseudo-homogêneos encontrados na literatura foi observar as possíveis diferenças e concordâncias nas simulações estacionária/dinâmica, permitindo uma melhor compreensão das possibilidades e limitações destes modelos para aplicações em simulação, controle e otimização.

Os modelos desenvolvidos se basearam nos trabalhos de Jutan et al. (1977) e Maciel Filho (1989), os quais incorporam as capacidades térmicas do fluido e do sólido,  $(\rho C_p)_f$  e  $(\rho C_p)_s$ , respectivamente, e na formulação clássica do modelo pseudo-homogêneo, Froment e Bischoff (1990).

A formulação dinâmica determinística destes modelos consiste de equações diferenciais parciais para o balanço de massa, energia, “momentum” e continuidade com apropriadas condições iniciais e de contorno. Os modelos incorporam variações nas propriedades físicas, nos parâmetros de transferência de calor e massa, na temperatura de refrigeração e pressão do reator, aspectos estes normalmente não considerados na literatura.

Na formulação destes modelos foram assumidas as seguintes considerações:

- variação das propriedades físicas do fluido (densidade, viscosidade, condutividade térmica, capacidade calorífica, entalpia de reação, peso molecular, velocidade superficial), e coeficientes de transferência de calor e massa ao longo do reator;
- perfil de velocidade “plug-flow”;
- dispersão axial desprezível;
- perfil de temperatura na entrada do leito plano;
- fluido reagente escoando cocorrente com o fluido refrigerante;
- porosidade uniforme.

Inicialmente é apresentado o modelo pseudo-homogêneo clássico, depois o modelo baseado em Jutan et al. (1977) e finalmente os modelos de Toledo e Maciel Filho baseado em Maciel Filho (1989). Estes modelos são apresentados para a equação da taxa de reação de Maciel Filho (1985). Os modelos para a equação de taxa de reação de Moura (1984) são apresentados no Apêndice II.

Com relação as propriedades físicas, coeficientes de transferência de calor e massa, e parâmetros operacionais e de projeto do reator catalítico de leito fixo utilizados, consultar o Apêndice III.

### **III.3.1 - Modelo Pseudo-Homogêneo Clássico**

Baseada na formulação de Froment e Bischoff (1990), a modelagem do reator catalítico de leito fixo considerando a condução de calor e massa na direção radial através de parâmetros efetivos é apresentada para a equação da taxa de reação de Maciel Filho (1985),  $R_{W1}$ . No caso do modelo para a taxa de reação de Moura (1984),  $R_{W2}$ , consultar o Apêndice II.

#### **Modelo Pseudo-Homogêneo Clássico**

As equações adimensionalizadas do modelo para a equação da taxa de reação  $R_{W1}$  podem ser escritas como:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{D_{ef}}{R_i^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right] - \frac{G}{\rho_g L} \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{PM \rho_B}{\rho_g} R_{W1} \quad (\text{III.14})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_{ef}}{\rho_g C_p R_i^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{G}{\rho_g L} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\rho_B (-\Delta H_R)}{\rho_g C_p T_{ref}} \frac{R_{W1}}{(R+1)} \quad (\text{III.15})$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{G}{\rho_g L} \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G^2 L}{\rho_g D_p p_{ref} g_c} f \right] \quad (\text{III.16})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_g V_f) = 0 \quad (\text{III.17})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_w}{\rho_R C_{PR}} (T(1, z, t) - T_R) \quad (\text{III.18})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{III.19})$$

$$r = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{th} (T_R - T(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{III.20})$$

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{III.21})$$

onde  $B_{th}$  é o número de Biot térmico,  $C_p$  e  $C_{PR}$  são os calores específicos do fluido reagente e do fluido refrigerante, (kcal/kg.K),  $g_c$  é uma constante de conversão de unidades, (kg/m.h<sup>2</sup>.atm),  $D_p$  diâmetro da partícula, (m),  $D_{ef}$  difusividade efetiva radial, (m/h),  $f$  fator de fricção da equação de Ergun, (Froment e Bischoff, 1990),  $G$  velocidade de fluxo mássico, (kg/m<sup>2</sup>.h),  $h_w$  coeficiente de transferência de calor na parede interna do reator, kcal/(h.m<sup>2</sup>.K).  $L$  comprimento do reator, (m),  $p$  a pressão total adimensional do reator,  $p_o$  a pressão na entrada do reator, (atm),  $p_{ref}$  a pressão de referência, (atm).  $PM$  é o peso molecular médio, (kg/kmol),  $r$  o comprimento radial adimensional do reator,  $R$  relação de alimentação ar/etanol e  $R_t$  raio do reator, (m).

$T$  é a temperatura adimensional do reator,  $T_{fo}$  a temperatura de alimentação, (K),  $T(1,z,t)$  a temperatura adimensional da parede do reator,  $T_R$  a temperatura adimensional do fluido refrigerante,  $T_{ro}$  a temperatura do fluido refrigerante na alimentação, (K),  $T_{ref}$  a temperatura de referência, (K),  $u_R$  a velocidade do fluido refrigerante, (m/h),  $V_f$  a velocidade superficial, (m/h),  $X$  a conversão,  $z$  o comprimento axial adimensional do reator,  $\lambda_{ef}$  a condutividade efetiva radial, (kcal/m.h.K),  $\Delta H_R$  a entalpia de reação molar, (kcal/kmol),  $\rho_g$  e  $\rho_R$  são as densidade do gás e do fluido refrigerante, respectivamente, (kg/m<sup>3</sup>),  $\rho_B$  densidade aparente do leito, (kgcat/m<sup>3</sup>) e  $R_{W1}$  é a taxa de reação de oxidação do etanol a acetaldeído sobre catalisador de Fe-Mo, (Nl/min.gcat.), Maciel Filho (1985).

### III.3.2 - Modelo Pseudo-Homogêneo Modificado

Estes modelos incorporam de forma implícita a presença do sólido no seu equacionamento, o que permite superar as dificuldades de representar satisfatoriamente o comportamento dinâmico do reator catalítico de leito fixo utilizando o modelo pseudo-homogêneo clássico.

Os modelos pseudo-homogêneo modificados além de reproduzir o comportamento dinâmico do reator, inclusive o fenômeno de resposta inversa, permitem uma análise rápida e confiável do desempenho de algoritmos de controle avançados em tempo real. Portanto, inicialmente será apresentado o desenvolvimento matemático para se chegar ao modelo baseado em Jutan et al. (1977) utilizando a equação da taxa de reação  $R_{W1}$ . Os demais modelos pseudo-homogêneos modificados seguem o mesmo desenvolvimento matemático, sendo apenas apresentados a seguir. No Apêndice II são apresentados os modelos modificados utilizando a taxa de reação de Moura (1984),  $R_{W2}$ .

### III.3.2.1 - Modelo baseado em Jutan et al.

Neste modelo é feita uma distinção entre a temperatura do gás,  $T_g$ , e a temperatura do sólido,  $T_s$ . Isto permite fazer um balanço de energia para o fluido reagente e outro para a partícula de catalisador, além dos demais balanços utilizados nos modelos anteriores. Portanto, as equações adimensionais que descrevem o reator são:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{D_{ef}}{\varepsilon R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right] - \frac{G}{\varepsilon \rho_f L} \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{PM \rho_B}{\varepsilon \rho_f} R_{w1} \quad (III.22)$$

Balanço de Energia do Fluido Reagente:

$$\rho_f C_{pf} \varepsilon \frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{\lambda_{ef}}{R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T_g}{\partial r} \right] - \frac{G C_{pf}}{L} \frac{\partial T_g}{\partial z} + h_f a_m \rho_B (T_s - T_g) \quad (III.23)$$

Balanço de Energia da Partícula de Catalisador:

$$-h_f a_m \rho_B (T_s - T_g) + \frac{\rho_B (-\Delta H_R)}{T_{ref}} \frac{R_{w1}}{(R+1)} = C_{ps} \rho_B \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (III.24)$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{G}{\rho_g L} \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G^2 L}{\rho_g D_p p_{ref} g_c} f \right] \quad (III.25)$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (III.26)$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_w}{\rho_R C_{PR}} (T(l, z, t) - T_R) \quad (III.27)$$



com as seguintes condições de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T_g}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{III.28})$$

$$r = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T_g}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T_g(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{III.29})$$

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T_g = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{III.30})$$

Os dois balanços de energia podem ser combinados eliminando o termo entre eles que descreve a transferência de calor entre o sólido e o gás:

$$h_f a_m \rho_B (T_s - T_g) \quad (\text{III.31})$$

e se é assumida a igualdade das temperaturas do sólido e do gás:

$$T_s = T_g = T \quad (\text{III.32})$$

As equações do modelo, portanto, ficam da seguinte forma:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{D_{ef}}{\varepsilon R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right] - \frac{G}{\varepsilon \rho_f L} \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{PM \rho_B}{\varepsilon \rho_f} R_{w1} \quad (\text{III.33})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_{ef}}{C_m R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{GC_{pf}}{C_m L} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\rho_B (-\Delta H_R)}{C_m T_{ref}} \frac{R_{w1}}{(R+1)} \quad (\text{III.34})$$

onde:  $C_m = \varepsilon (\rho_f C_{pf}) + \rho_B C_{ps}$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{G}{\rho_g L} \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G^2 L}{\rho_g D_p p_{ref} g_c} f \right] \quad (\text{III.35})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{III.36})$$

Balanco de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_w}{\rho_R C_{PR}} (T(1, z, t) - T_R) \quad (\text{III.37})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{III.38})$$

$$r = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{III.39})$$

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{III.40})$$

onde  $a_m$  área de transferência de calor do catalisador, ( $\text{m}^2/\text{kgcat}$ ),  $C_{ps}$  é o calor específico do catalisador, ( $\text{kcal}/\text{kgcat.K}$ ),  $h_f$  o coeficiente de transferência de calor do catalisador para o fluido, ( $\text{kcal}/\text{m}^2.\text{h.K}$ ),  $T_g$  a temperatura adimensional do fluido reagente,  $T_s$  a temperatura adimensional da partícula do catalisador,  $\rho_s$  a densidade do catalisador, ( $\text{kgcat}/\text{m}^3$ ),  $\varepsilon$  a porosidade do leito e as demais variáveis e parâmetros são os mesmas comentadas anteriormente.

### III.3.2.2. - Modelo de Toledo e Maciel Filho

Balanco de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{D_{\text{eff}}}{R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right] - \frac{G_i}{\rho_f L} \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon)PM\rho_s}{\varepsilon\rho_f} R_{w1} \quad (\text{III.41})$$

Balanco de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_{\text{ef}}}{C_m R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{\varepsilon G_i C_{pf}}{C_m L} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon)\rho_s(-\Delta H_R)}{C_m T_{\text{ref}}} \frac{R_{w1}}{(R+1)} \quad (\text{III.42})$$

onde:  $C_m = \varepsilon (\rho_f C_{pf}) + (1 - \varepsilon) (\rho_s C_{ps})$

Balanco da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{G_i}{\rho_g L} \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G_i^2 L}{\rho_g D_p P_{\text{ref}} g_c} f \right] \quad (\text{III.43})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{III.44})$$

Balanco de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_w}{\rho_R C_{PR}} (T(1,z,t) - T_R) \quad (\text{III.45})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r=0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{III.46})$$

$$r=1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T(1,z,t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{III.47})$$

$$z=0 \quad X=0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{\text{ref}}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{\text{ref}}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{\text{ref}}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{III.48})$$

onde  $G_i$  é a velocidade de fluxo mássico intersticial, ( $\text{kg/m}^2\cdot\text{h}$ ), e  $D_{\text{eff}}$  a difusividade efetiva radial intersticial, ( $\text{m/h}$ ), as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada.

No Apêndice V é apresentado a aplicação do método da colocação ortogonal aos modelos apresentados.

### III.4 – Técnicas de Redução

A solução de problemas de difusão/reação multidimensional apresenta dificuldades associadas com um marcante envolvimento analítico e também requer considerável esforço computacional. Considerando estes fatos, torna-se de interesse para aplicação prática em engenharia, propor formulações mais simples do sistema de equações diferenciais parciais original, através da redução do número de variáveis independentes do mesmo. Portanto, uma ou mais variáveis independentes podem ser integradas, resultando formulações aproximadas que retém detalhada informação local na variável remanescente e informação média nas direções eliminadas pela integração. Esta informação provém das condições de contorno relacionadas com as direções eliminadas.

Diferentes níveis de aproximações, reduções, gerando formulações diferenciais agregadas são investigadas, começando com a técnica de redução clássica em direção da técnica baseada nas fórmulas de integração de Hermite. Então, uma alternativa para reduzir a dimensionalidade de um sistema de equações diferenciais parciais que representam um reator catalítico de leito fixo e, portanto, reduzir o tempo computacional exigido para simulações estacionárias/dinâmicas, é aplicar uma técnica de redução ao modelo do reator.

No caso do reator catalítico de leito fixo, a técnica de redução promove uma formulação aproximada para descrever perfis axiais como uma função do tempo pela conveniente eliminação explícita da dependência na variável radial. Isto é alcançado pela definição de novas variáveis dependentes baseadas nos valores radiais médios em qualquer posição axial.

Por exemplo, a técnica clássica consiste na aplicação dos princípios do teorema da média, gerando uma variável média através de uma determinada direção espacial, no caso do reator catalítico de leito fixo, a direção radial, Toledo e Maciel Filho (1997a). Em geral tem-se:

$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r \, dr \quad (\text{III.49})$$

onde  $[ ]_m$  define um valor radial médio da quantidade dentro do colchete esquerdo.

Dependendo da técnica de redução aplicada, diferenças nos modelos unidimensionais gerados vão ocorrer somente na equação do balanço de energia do fluido reagente, permanecendo os demais balanços semelhantes. Este fato é decorrente da condição de contorno de troca térmica na parede do reator. Com a equação da conversão não ocorre este problema, pois não há condição de contorno de transferência de massa na parede do reator catalítico de leito fixo.

As equações do modelo unidimensional são similares a do bidimensional, exceto a presença dos termos e condições de contorno na direção radial. Portanto, a equação da temperatura do modelo pseudo-homogêneo modificado unidimensional baseado em Maciel Filho (1989) utilizando a equação da taxa de reação  $R_{W1}$  fica da seguinte forma:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = \frac{2\lambda_{ef} B_{ih}^*}{C_m R_t^2} (T_R - T_m) - \frac{\varepsilon G_i C_{pf}}{C_m L} \frac{\partial T_m}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon)\rho_s(-\Delta H_R)}{C_m T_{ref}} \frac{R_{W1}}{(R+1)} \quad (III.50)$$

onde  $T_m$  é a temperatura radial média e  $B_{ih}^*$  é o número de Biot modificado que varia conforme a técnica de redução de modelo aplicada, exceto no caso da aplicação da técnica de Pirkle et al., na qual todo o primeiro termo do lado direito depois da igualdade da equação (III.50) se modifica.

Na equação (III.50) o  $B_{ih}^*$  tem valor numérico igual ao  $B_{ih}$  do modelo bidimensional no qual se aplicou a técnica de redução clássica. Caso outra técnica de redução, excluindo a de Pirkle et al., seja aplicada ao mesmo modelo bidimensional uma expressão matemática diferente para o  $B_{ih}^*$  é gerada, mas permanecendo a equação da temperatura do fluido reagente do modelo unidimensional gerado semelhante a da equação (III.50).

A seguir são apresentadas as técnicas de redução utilizadas neste trabalho.

### Técnicas de Redução Clássica

Esta técnica baseia-se no teorema do valor médio, isto é, o valor radial médio definido para cada variável é dado por Maciel Filho (1989), Toledo e Maciel Filho (1997a):

$$[\ ]_m = \frac{\int_0^1 [\ ] r \, dr}{\int_0^1 r \, dr} \quad (\text{III.51})$$

Portanto:

$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r \, dr \quad (\text{III.52})$$

onde  $[\ ]_m$  define um valor radial médio da quantidade dentro do colchete esquerdo.

O número de Biot modificado gerado,  $B_{ih}^*$ , por esta técnica é semelhante em valor numérico ao  $B_{ih}$  do modelo bidimensional no qual foi aplicado a técnica de redução clássica, isto é:

$$B_{ih}^* = B_{ih} \quad (\text{III.53})$$

No entanto, há diferença conceitual entre o Biot modificado,  $B_{ih}^*$ , e o Biot do modelo bidimensional,  $B_{ih}$ . Este cuidado deve ser lembrado também com as demais técnicas de redução a serem apresentadas. Para mais detalhes sobre nomenclatura e conceitos relacionados sobre coeficientes de troca térmica consultar Froment e Bischoff (1990), Giudici (1990), Dixon (1996) e Jorge (1998).

Mais detalhes sobre a técnica de redução clássica consultar McGreavy e Naim (1977), McGreavy (1983), Maciel Filho (1989), McGreavy e Maciel Filho (1989), Stremel et al. (1997, 1998, 1999), Toledo e Maciel Filho (1997a, 1997b, 1997c).

### **Técnica baseada nas Fórmulas de Integração de Hermite**

Hermite desenvolveu um modo de aproximar uma integral baseado nos valores do integrando e suas derivadas nos limites da integração, da seguinte forma:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} y(x) dx = \sum_{v=0}^{\alpha} C_v y^{(v)}(x_{i-1}) + \sum_{v=0}^{\beta} D_v y^{(v)}(x_i) \quad (\text{III.54})$$

onde  $y(x)$  e suas derivadas  $y^{(v)}(x)$  são definidas para todo intervalo de  $x \in (x_{i-1}, x_i)$ .

Além disso, é assumido que o valor numérico de  $y^{(v)}(x_{i-1})$  para  $v = 0, 1, 2, \dots, \alpha$  e  $y^{(v)}(x_i)$  para  $v = 0, 1, 2, \dots, \beta$  são disponíveis nos dois extremos do intervalo.

Desta maneira, a integral de  $y(x)$  é expressa como uma combinação linear de  $y(x_{i-1})$ ,  $y(x_i)$  e suas derivadas,  $y^{(v)}(x_{i-1})$  para  $v = 1, 2, \dots, \alpha$  e  $y^{(v)}(x_i)$  para  $v = 1, 2, \dots, \beta$ . Esta aproximação é chamada de  $H_{\alpha, \beta}$ .

No presente trabalho, foram consideradas as duas aproximações,  $H_{0,0}$  e  $H_{1,1}$ , dados por:

$$H_{0,0} = \int_0^h y(x) dx \cong \frac{h}{2} [y(0) + y(h)] \quad (\text{III.55})$$

$$H_{1,1} = \int_0^h y(x) dx \cong \frac{h}{2} [y(0) + y(h)] + \frac{h}{12} [y'(0) - y'(h)] \quad (\text{III.56})$$

os quais correspondem, respectivamente, as leis de integração do trapézio e trapézio corrigido.

Portanto, esta técnica faz uso simultâneo das seguintes equações, as quais são aplicadas ao modelo que se deseja reduzir.

$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r dr \quad (\text{III.57})$$

$$H_{0,0} = \int_0^1 y(x) dx \cong \frac{1}{2} [y(0) + y(1)] \quad (\text{III.58})$$

$$H_{1,1} = \int_0^1 y(x) dx \cong \frac{1}{2} [y(0) + y(1)] + \frac{1}{12} [y'(0) - y'(1)] \quad (\text{III.59})$$

No caso do sistema ser em coordenadas cilíndricas a aproximação  $H_{0,0}/H_{0,0}$  é equivalente a técnica de redução clássica, mas utilizando a aproximação  $H_{0,0}/H_{1,1}$  tem-se a seguinte expressão matemática para o número de Biot modificado:

$$B_{ih}^* = \frac{4B_{ih}}{B_{ih} + 4} \quad (\text{III.60})$$

O interessante desta técnica é que ela gera facilmente, só com conceitos matemáticos, o mesmo modelo unidimensional quando se utiliza a técnica de redução clássica com uma equação quadrática para a temperatura do reator em função da temperatura radial média, equação (III.61). Isto é, utilizando a técnica de redução clássica com a equação (III.61) chega-se ao mesmo número de Biot modificado, equação (III.60), que aplicando a técnica de redução de Hermite, só que com maior dificuldade matemática, Maciel Filho (1989) e Toledo e Maciel Filho (1998b, 1998c).

$$T(r) = T_m b - b r^2 \quad (\text{III.61})$$

onde  $T_m$  é a temperatura radial média do reator. Maiores detalhes são apresentados no Apêndice IV.

Mais detalhes consultar Corrêa e Cotta (1994), Corrêa e Cotta (1996), Stremel et al. (1997, 1998, 1999), Maciel Filho (1989) e Toledo e Maciel Filho (1997a, 1997b, 1997c, 1997d, 1998c).

### **Técnica baseada na proposta de Finlayson**

Através da discretização do termo radial do modelo do reator catalítico de leito fixo por colocação ortogonal, e utilizando apenas um ponto de colocação, Finlayson manipula analiticamente as equações obtidas e chega a um modelo unidimensional semelhante ao se aplicar qualquer uma das duas técnicas de redução apresentadas anteriormente ao modelo bidimensional.

Portanto, o modelo unidimensional baseado em Finlayson (1971) só vai diferenciar dos demais modelos reduzidos pela expressão matemática do Biot modificado,  $B_{ih}^*$ , cuja expressão é dada por:

$$B_{ih}^* = \frac{3B_{ih}}{B_{ih} + 3} \quad (\text{III.62})$$

A técnica de redução baseada em Finlayson consiste em aplicar o teorema da média:



$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r dr \quad (\text{III.63})$$

nas equações do modelo e substituir o número de Biot ,  $B_{ih}$ , pelo número de Biot modificado,  $B_{ih}^*$ , dado pela equação (III.62).

Mais detalhes consultar Finlayson (1971), Pirkle et al. (1987), Stremel et al. (1997, 1998, 1999), Toledo (1997) e Toledo e Maciel Filho (1997a, 1997b, 1997c, 1997d, 1998c).

### **Técnica baseada em Pirkle et al.**

A técnica proposta por Pirkle et al. (1987) admite a condição de um equilíbrio térmico local em cada posição axial do reator catalítico de leito fixo. Então, a partir desta suposição Pirkle et al. apresentam uma solução analítica para a temperatura do fluido reagente da seguinte forma:

$$T(r,z,t) = T_R + \frac{1}{A} \left( \frac{4\alpha}{B_{ih}} - 2 \ln(1 - \alpha + \alpha r^2) \right) \quad (\text{III.64})$$

onde as variáveis  $\alpha$ ,  $A$  e  $B$  são calculadas pelas seguintes expressões:

$$A = \frac{\partial(\ln R_w(X_m, T_m))}{\partial T} \quad (\text{III.65})$$

$$B = \frac{\partial^2(\ln R_w(X_m, T_m))}{\partial T^2} \quad (\text{III.66})$$

$$A(T_m - T_R) = \frac{4\alpha}{B_{ih}} - \ln(1 - \alpha) + \frac{1}{3} \frac{B^2}{A} \ln^2(1 - \alpha) \quad (\text{III.67})$$

onde  $X_m$  e  $T_m$  são variáveis radiais médias da conversão e temperatura do reator numa dada posição axial.

Para avaliar o valor da variável  $\alpha$  é necessário utilizar um método para calcular raiz de uma equação não-linear. Neste trabalho foram utilizados os métodos de Newton-Raphson, Homotopia e Levenberg-Marquart. Para mais detalhes destes métodos consultar os Apêndices VI e VII.

Ao se aplicar o teorema da média:

$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r dr \quad (\text{III.68})$$

na equação da temperatura do fluido reagente, tem-se que:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = \frac{2\lambda_{ef} B_{ih}}{C_m R_t^2} (T_R - T_m) - \frac{\varepsilon G_i C_{pf}}{C_m L} \frac{\partial T_m}{\partial z} + \frac{(1 - \varepsilon) \rho_s (-\Delta H_R)}{C_m T_{ref}} \frac{R_w}{(R + 1)} \quad (\text{III.69})$$

Utilizando a equação (III.64) para calcular a expressão de  $T(1, z, t)$ , tem-se que:

$$T(1, z, t) = T_R + \frac{4\alpha}{B_{ih} A} \quad (\text{III.70})$$

ou

$$B_{ih} (T(1, z, t) - T_R) = \frac{4\alpha}{A} \quad (\text{III.71})$$

admitindo que  $T(1, z, t) \cong T_m$ , a equação anterior fica da seguinte forma:

$$B_{ih} (T_m - T_R) = \frac{4\alpha}{A} \quad (\text{III.72})$$

Substituindo a equação (III.72) em (III.69):

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = - \frac{8\lambda_{ef}}{C_m R_t^2} \frac{\alpha}{A} - \frac{\varepsilon G_i C_{pf}}{C_m L} \frac{\partial T_m}{\partial z} + \frac{(1 - \varepsilon) \rho_s (-\Delta H_R)}{C_m T_{ref}} \frac{R_{w1}}{(R + 1)} \quad (\text{III.73})$$

A aplicação da técnica de redução de Pirkle et al. (1987) promove uma modificação mais significativa na equação da temperatura do que simplesmente propor uma expressão matemática para o número de Biot modificado. Porém, esta técnica leva a uma maior dificuldade analítica/computacional comparada com as demais técnicas de redução.

Portanto, isto inviabiliza a sua utilização em determinadas situações para fins de aplicação em controle em tempo real.

Mais detalhes consultar Hagan et al. (1987), Pirkle et al. (1987), Hagan et al. (1988a), Hagan et al. (1988b), Kheshgi et al. (1988), Stremel et al. (1997, 1998, 1999) e Toledo e Maciel Filho (1997a, 1997b, 1997c, 1997d, 1998c).

### **Técnica de Redução Utilizando Um Ponto de Colocação Ortogonal Radial Interno**

Uma outra técnica empregada para gerar um modelo reduzido, a qual não elimina uma dimensão do reator como as descritas anteriormente, foi a aplicação do método da colocação ortogonal dupla ao modelo bidimensional do reator com apenas um ponto de colocação ortogonal interno na direção radial, Toledo e Maciel Filho (1998c, 1999a, 1999b), Stremel et al. (1998, 1999).

Portanto, a solução do modelo é semelhante ao modelo bidimensional, sendo que neste último foram utilizados 5 pontos de colocação radial interno. Deve-se ressaltar, que esta técnica requer tempos computacionais de solução semelhantes aos modelos desenvolvidos pelas técnicas de redução descritas anteriormente.

## **III 5- Modelos Unidimensionais**

Os modelos unidimensionais foram gerados pela aplicação das diferentes técnicas de redução, apresentadas anteriormente, aos modelos bidimensionais do reator catalítico de leito fixo estudados neste trabalho. Conforme a técnica de redução aplicada, um modelo unidimensional específico é determinado. Nestes modelos, os balanços de massa e energia são reescritos em termos de potenciais agregados radialmente, resultando em modelos transientes alternativos unidimensionais simplificados, os quais mantêm o mesmo grau de simplicidade.

Afim de exemplificar a aplicação das técnicas de redução e a geração dos modelos unidimensionais, escolheu-se um modelo bidimensional pseudo-homogêneo genérico utilizando a equação da taxa de reação  $R_{W1}$ . Procedimento matemático semelhante pode ser aplicado aos modelos bidimensionais estudados para gerar os modelos unidimensionais correspondentes.

Como as equações do modelo unidimensional são similares a do bidimensional exceto a presença dos termos e condições de contorno na

direção radial, as equações do modelo onde serão aplicadas as técnicas de redução são os balanços de massa e energia do fluido reagente. Escrevendo as equações do modelo bidimensional pseudo-homogêneo genérico para um reator catalítico de leito fixo tem-se que:

### Modelo Pseudo-Homogêneo Genérico utilizando $R_{w1}$ :

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \alpha_1 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right] + \beta_1 \frac{\partial X}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1} \quad (\text{III.74})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \beta_2 \frac{\partial T}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1} \quad (\text{III.75})$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta_3 \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma_3 f \right] \quad (\text{III.76})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{III.77})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \beta_4 \frac{\partial T_R}{\partial z} + \gamma_4 (T(1, z, t) - T_R) \quad (\text{III.78})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{III.79})$$

$$r = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{III.80})$$

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{III.81})$$

onde  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  são os parâmetros do modelo e as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada.

### Aplicação da Técnica de Redução Clássica

Inicialmente aplica-se o teorema da média:

$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r \, dr \quad (\text{III.82})$$

às equações (III.74) e (III.75) com a finalidade de eliminar a dimensão radial.

Portanto, tem-se que:

Balanço de Massa:

$$2 \int_0^1 \frac{\partial X}{\partial t} r \, dr = \alpha_1 2 \int_0^1 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right] r \, dr + \beta_1 2 \int_0^1 \frac{\partial X}{\partial z} r \, dr + \gamma_1 2 \int_0^1 R_{w1}(X, T) r \, dr \quad (\text{III.83})$$

Balanço de Energia:

$$2 \int_0^1 \frac{\partial T}{\partial t} r \, dr = \alpha_2 2 \int_0^1 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] r \, dr + \beta_2 2 \int_0^1 \frac{\partial T}{\partial z} r \, dr + \gamma_2 2 \int_0^1 R_{w1}(X, T) r \, dr \quad (\text{III.84})$$

Resolvendo as integrais tem-se:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = 2 \alpha_1 \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right]_0^1 + \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.85})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2 \alpha_2 \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right]_0^1 + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.86})$$

Substituindo as condições de contorno, equações (III.79) e (III.80), nas equações (III.85) e (III.86), tem-se que:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.87})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2 \alpha_2 B_{ih} (T_R - T(1, z, t)) + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.88})$$

admitindo que  $T(1, z, t) \cong T_m$ , e definindo o número de Biot modificado,  $B_{ih}^*$ , pela equação a seguir:

$$B_{ih}^* = B_{ih} \quad (\text{III.89})$$

### **Modelo Unidimensional Gerado pela Técnica de Redução Clássica:**

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.90})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2 \alpha_2 B_{ih}^* (T_R - T_m) + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.91})$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta_3 \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma_3 f \right] \quad (\text{III.92})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{III.93})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \beta_4 \frac{\partial T_R}{\partial z} + \gamma_4 (T(l, z, t) - T_R) \quad (\text{III.94})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad (\text{III.95})$$

onde  $X_m$ ,  $T_m$  são a conversão e a temperatura radiais médias do reator geradas pela técnica de redução clássica,  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  são os parâmetros do modelo e as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada.

### **Aplicação da Técnica de Redução de Hermite - Aproximação $H_{1,1}/H_{0,0}$**

A técnica de Hermite para o caso do reator catalítico de leito fixo faz uso da equação do teorema da média:

$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r \, dr \quad (\text{III.96})$$

e da aproximação  $H_{1,1}$  para gerar as expressões da conversão e temperatura radiais médias do reator.

Aproximação  $H_{1,1}$  de  $[\ ]_m$ :

$$H_{1,1} = [\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r \, dr = 2 \left\{ \frac{1}{2} [(r[\ ])]_{r=1} + (r[\ ])]_{r=0} \right\} + \frac{1}{12} \left[ \frac{\partial(r[\ ])}{\partial r} \Big|_{r=0} - \frac{\partial(r[\ ])}{\partial r} \Big|_{r=1} \right] \quad (\text{III.97})$$

Aplicando a equação (III.97) para a conversão,  $X$ , e a temperatura,  $T$ , do reator respectivamente, tem-se as seguintes expressões dos valores médios radiais:

$$X_m = X(1,z,t) + \frac{1}{6} [X(0,z,t) - X(1,z,t)] \quad (\text{III.98})$$

$$T_m = T(1,z,t) + \frac{1}{6} \left[ T(0,z,t) - T(1,z,t) - \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=1} \right] \quad (\text{III.99})$$

Substituindo a equação (III.80), condição de contorno, na equação (III.99), as expressões dos valores radiais médios para a conversão e a temperatura são:

$$X_m = X(1,z,t) + \frac{1}{6} [X(0,z,t) - X(1,z,t)] \quad (\text{III.100})$$

$$T_m = T(1,z,t) + \frac{1}{6} [T(0,z,t) - T(1,z,t) - B_{th} (T_R - T(1,z,t))] \quad (\text{III.101})$$

As equações (III.100) e (III.101) são funções de  $X(0,z,t)$ ,  $X(1,z,t)$ ,  $T(0,z,t)$  e  $T(1,z,t)$ , logo estes valores precisam ser determinados. Procede-se da seguinte forma:

$$\int_0^1 \frac{\partial X}{\partial r} \, dr = X(1,z,t) - X(0,z,t) \quad (\text{III.102})$$

a equação acima é a definição de integral definida da derivada parcial de  $X$  em relação a variável radial no intervalo de 0 à 1.

Agora utilizando a aproximação  $H_{0,0}$  para integral anterior, temos que:



$$H_{0,0} = \int_0^1 \frac{\partial X}{\partial r} dr \cong \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial X}{\partial r} \Big|_{r=0} + \frac{\partial X}{\partial r} \Big|_{r=1} \right] \quad (\text{III.103})$$

Substituindo as equações (III.79) e (III.80), condições de contorno, na equação (III.103), obtem-se:

$$H_{0,0} = \int_0^1 \frac{\partial X}{\partial r} dr \cong 0 \quad (\text{III.104})$$

Igualando as equações (III.102) e (III.104), tem-se que:

$$X(0,z,t) = X(1,z,t) \quad (\text{III.105})$$

Fazendo um procedimento matemático semelhante para determinar  $T(0,z,t)$  e  $T(1,z,t)$ , tem-se o seguinte desenvolvimento:

$$\int_0^1 \frac{\partial T}{\partial r} dr = T(1,z,t) - T(0,z,t) \quad (\text{III.106})$$

$$H_{0,0} = \int_0^1 \frac{\partial T}{\partial r} dr \cong \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} + \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=1} \right] \quad (\text{III.107})$$

Substituindo as equações (III.79) e (III.80), condições de contorno, na equação (III.107):

$$H_{0,0} = \int_0^1 \frac{\partial T}{\partial r} dr \cong \frac{1}{2} B_{ih} (T_R - T(1,z,t)) \quad (\text{III.108})$$

Igualando as equações (III.106) e (III.108) tem-se que:

$$T(0,z,t) = T(1,z,t) \left[ 1 + \frac{1}{2} B_{ih} \right] - \frac{1}{2} B_{ih} T_R \quad (\text{III.109})$$

Portanto, substituindo as equações (III.105) e (III.109) nas equações (III.100) e (III.101), as expressões para a conversão e temperatura radiais médias do reator ficam da seguinte forma:

$$X_m = X(1, z, t) \quad (\text{III.110})$$

$$T_m = \left[ 1 + \frac{B_{ih}}{4} \right] T(1, z, t) - \frac{B_{ih}}{4} T_R \quad (\text{III.111})$$

Logo as aproximações  $H_{1,1}/H_{0,0}$  são:

$$X(1, z, t) = X_m \quad (\text{III.112})$$

$$T(1, z, t) = \frac{\left[ T_m + \frac{B_{ih}}{4} T_R \right]}{\left[ 1 + \frac{B_{ih}}{4} \right]} \quad (\text{III.113})$$

Agora aplicando o teorema da média nas equações (III.74) e (III.75), tem-se as seguintes expressões:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = 2 \alpha_1 \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right]_0^1 + \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.114})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2 \alpha_2 \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right]_0^1 + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.115})$$

Substituindo as condições de contorno, equações (III.79) e (III.80), nas equações (III.114) e (III.115), tem-se que:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.116})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2 \alpha_2 B_{ih} (T_R - T(l, z, t)) + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (III.117)$$

como

$$T(l, z, t) = \left[ \frac{T_m + \frac{B_{ih}}{4} T_R}{\left[ 1 + \frac{B_{ih}}{4} \right]} \right] \quad (III.118)$$

e definindo o número de Biot modificado,  $B_{ih}^*$ , pela equação a seguir:

$$B_{ih}^* = \frac{4B_{ih}}{B_{ih} + 4} \quad (III.119)$$

### **Modelo Unidimensional Gerado pela Técnica de Redução de Hermite:**

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (III.120)$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2 \alpha_2 B_{ih}^* (T_R - T_m) + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (III.121)$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta_3 \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma_3 f \right] \quad (III.122)$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (III.123)$$

**Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:**

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \beta_4 \frac{\partial T_R}{\partial z} + \gamma_4 (T(1, z, t) - T_R) \quad (\text{III.124})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad (\text{III.125})$$

onde  $X_m$ ,  $T_m$  são a conversão e a temperatura radiais médias do reator geradas pela técnica de redução de Hermite,  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  são os parâmetros do modelo e as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada.

Portanto, a única diferença entre as duas técnicas, clássica e de Hermite, é a expressão matemática para o número de Biot modificado,  $B_{ih}^*$ , gerado.

### **Aplicação da Técnica de Redução de Finlayson**

O modelo unidimensional gerado pela técnica de Finlayson (1971), só vai diferenciar dos demais modelos reduzidos pela expressão matemática do número de Biot modificado,  $B_{ih}^*$ , utilizada no modelo. A técnica é simplesmente aplicar o teorema da média ao modelo bidimensional do reator e substituir o número de Biot gerado pela expressão a seguir:

$$B_{ih}^* = \frac{3B_{ih}}{B_{ih} + 3} \quad (\text{III.126})$$

### **Modelo Unidimensional Gerado pela Técnica de Finlayson:**

**Balanço de Massa:**

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.127})$$

**Balanço de Energia:**

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2\alpha_2 B_{ih}^* (T_R - T_m) + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{W1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.128})$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta_3 \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma_3 f \right] \quad (\text{III.129})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{III.130})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \beta_4 \frac{\partial T_R}{\partial z} + \gamma_4 (T(l, z, t) - T_R) \quad (\text{III.131})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad (\text{III.132})$$

onde  $X_m$ ,  $T_m$  são a conversão e a temperatura radiais médias do reator geradas pela técnica de redução de Finlayson,  $B_{ih}^*$ , o Biot modificado dado pela equação (III.126),  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  são os parâmetros do modelo e as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada.

### Técnica baseada em Pirkle et al.

A partir da suposição de um equilíbrio térmico local em cada posição axial do reator catalítico de leito fixo, Pirkle et al. apresentam uma solução analítica para a temperatura do fluido reagente da seguinte forma:

$$T(r, z, t) = T_R + \frac{1}{A} \left( \frac{4\alpha}{B_{ih}} - 2 \ln(1 - \alpha + \alpha r^2) \right) \quad (\text{III.133})$$

a qual resulta da proposta de Pirkle et al. as seguintes expressões para a conversão e temperatura radiais médias do reator:

$$X_m = X(r, z, t) \quad (\text{III.134})$$

$$A(T_m - T_R) = \frac{4\alpha}{B_{ih}} - \ln(1 - \alpha) + \frac{1}{3} \frac{B^2}{A} \ln^2(1 - \alpha) \quad (\text{III.135})$$

onde A e B são calculadas pelas seguintes expressões:

$$A = \frac{\partial(\ln R_w(X_m, T_m))}{\partial T} \quad (\text{III.136})$$

$$B = \frac{\partial^2(\ln R_w(X_m, T_m))}{\partial T^2} \quad (\text{III.137})$$

O valor da variável  $\alpha$  é calculado por algum método numérico para achar a raiz de uma equação algébrica não-linear, isto é, o valor de  $\alpha$  que zera a equação (III.135).

A técnica consiste em se aplicar o teorema da média:

$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r \, dr \quad (\text{III.138})$$

as equações (III.74) e (III.75) do modelo, o que resulta em:

Balanco de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = 2 \alpha_1 \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right]_0^1 + \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.139})$$

Balanco de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2 \alpha_2 \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right]_0^1 + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.140})$$

Substituindo as condições de contorno, equações (III.79) e (III.80), nas equações (III.139) e (III.140), tem-se que:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.141})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = 2 \alpha_2 B_{ih}(T_R - T(1, z, t)) + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.142})$$

Necessita-se de uma expressão para  $T(1, z, t)$  a fim de poder gerar adequadamente o modelo unidimensional. Para isto, faz-se uso da equação (III.133) para gerar a expressão de  $T(1, z, t)$ , o que resulta na seguinte equação:

$$T(1, z, t) = T_R + \frac{4\alpha}{B_{ih} A} \quad (\text{III.143})$$

Substituindo a equação (III.143) na equação (III.142) tem-se o modelo unidimensional pela técnica de Pirkle et al..

### **Modelo Unidimensional Gerado pela Técnica de Pirkle et al.:**

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_m}{\partial t} = \beta_1 \frac{\partial X_m}{\partial z} + \gamma_1 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.144})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T_m}{\partial t} = -\frac{8 \alpha_2 \alpha}{A} + \beta_2 \frac{\partial T_m}{\partial z} + \gamma_2 R_{w1}(X_m, T_m) \quad (\text{III.145})$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta_3 \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma_3 f \right] \quad (\text{III.146})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{III.147})$$

Balanco de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \beta_4 \frac{\partial T_R}{\partial z} + \gamma_4 (T(l, z, t) - T_R) \quad (\text{III.148})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad (\text{III.149})$$

onde  $X_m$ ,  $T_m$  são a conversão e a temperatura radiais médias do reator geradas pela técnica de redução de Pirkle et al.,  $\alpha$  e  $A$  são parâmetros calculados pelas equações (III.135), (III.136) e (III.137),  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  são os parâmetros do modelo, e as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada. Portanto, a técnica de redução de Pirkle et al. produz uma modificação mais significativa na equação da temperatura do que gerar uma expressão matemática para a número de Biot modificado como as demais técnicas. No entanto, o novo termo resultante expressa o mesmo efeito que o termo gerado pelas demais técnicas estudadas.

Os modelos unidimensionais estudados no presente trabalho foram gerados pela aplicação destas técnicas de redução aos modelos bidimensionais apresentados anteriormente. O procedimento matemático é semelhante ao descrito, só havendo mudanças entre os modelos unidimensionais gerados pela mesma técnica de redução devido as expressões dos parâmetros  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  do modelo bidimensional utilizado. Com relação a artigos que tratam sobre outras técnicas de redução, consultar as seguintes referências: Ahmedi e Fahein (1980a, 1980b), Khanna e Seinfeld (1987), Dixon (1996), Liu et al. (1996) e Jorge (1998).



Mais detalhes sobre a aplicação do método da colocação ortogonal aos modelos citados anteriormente são apresentados no Apêndice V.

### **III.6- Métodos Numéricos**

#### **III.6.1 - Colocação Ortogonal**

Modelos dinâmicos do tipo “Fickianos” de um reator catalítico de leito fixo representam um sistema muito rígido de equações diferenciais parciais parabólica/elíptica (EDPs) devido à grande razão de capacidade térmica sólido/fluido, tipicamente ao redor de 100.

A solução numérica deste tipo de sistemas envolve normalmente uma discretização das variáveis espaciais tal que as EDPs sejam convertidas em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs). As técnicas de discretização mais populares são diferenças finitas e colocação ortogonal.

As vantagens de empregar diferenças finitas encontra-se na sua facilidade de implementação computacional e na confiança e estabilidade da solução correspondente. Entretanto, para descrever o comportamento dinâmico de um reator catalítico de leito fixo é necessário empregar muitos pontos de malhas para alcançar a requerida estabilidade e convergência. Isto é muito dispendioso em termos de tempo computacional e impraticável para estudos de controle/otimização. Apesar da existência de algumas modificações as quais reduzem o número de pontos da malha significativamente, os mais populares métodos da diferenças finitas tem permanecido os de Crank-Nicolson para modelos estacionários e o da Direção Alternada (DA) implícito/explicito para modelos dinâmicos.

Com relação a colocação ortogonal, este método está contido dentro da classe geral de técnicas de aproximação conhecidas como método dos resíduos ponderados, o qual também incluem os métodos de Galerkin, Integral, Mínimos Quadrados e Momentos como casos especiais. As variáveis envolvidas são expandidas em termos de uma função tentativa polinomial e as EDPs são satisfeitas nos pontos discretos ou pontos de colocação os quais resultarão num conjunto de EDOs. Estas EDOs são expressas normalmente em termos do valor da solução nos pontos de colocação, e a colocação ortogonal pode ser aplicada em uma das duas ou em ambas direções espaciais.

Para modelos de estado estacionário, na qual dispersão axial não é normalmente considerada, a variável espacial radial é discretizada e as equações, agora um sistema de EDOs, podem ser integradas ao longo da direção axial. Se dispersão axial é incluída, colocação ortogonal pode ser aplicada em ambas direções radial e axial, a chamada colocação dupla e as

equações do modelo são transformadas dentro de um sistema de equações algébricas não-lineares.

Para a simulação do comportamento dinâmico há necessidade da aplicação da colocação dupla, transformando o modelo num conjunto de EDOs, as quais são integradas no tempo, Método das Linhas.

Obter a solução por colocação ortogonal é geralmente mais rápido do que pelo método das diferenças finitas para equivalente precisão devido ao uso de um número reduzido de pontos de malha, pontos de colocação. Entretanto, se polinômios de alta ordem são empregados como funções tentativas, a solução computada pode ondular e desde que as formulas da colocação ortogonal são usadas para aproximar derivadas, os problemas com este comportamento podem ser significantes.

Carey e Finlayson (1975) desenvolveram o método da colocação ortogonal em elementos finitos, o qual permite aplicar polinômios de ordem menor para seções finitas do domínio. A principal vantagem deste procedimento é sua habilidade para computar perfis de gradientes agudos empregando aproximação de ordem baixa, então precavendo oscilações artificiais na resposta.

Normalmente, o termo de dispersão axial é negligenciado em muitas situações e o modelo estacionário pode ser resolvido tanto pela aplicação de colocação ortogonal na direção radial e integração ao longo da direção axial, ou pelo emprego da colocação dupla. A primeira estratégia é preferida desde que é geralmente mais fácil de resolver do que um sistema de equações algébricas não-lineares. Além do mais, qualquer variação radial de parâmetros de transporte, propriedades físicas, perfil de velocidade e porosidade do leito são facilmente incluídas no esquema colocação radial/integração axial, Toledo e Maciel (1995). Mais detalhes sobre a utilização da colocação ortogonal dupla conjuntamente com um método de solução de um sistema de equações algébricas consultar os Apêndices V, VI e VII.

O maior problema da técnica da colocação ortogonal em elementos finitos é que esta é somente efetiva se os elementos, seções, são escolhidos otimamente. Esta seleção não é trivial e pode levar a técnica a ser ineficaz em situações onde a localização dos gradientes agudos é desconhecido ou não permanece fixa. A colocação ortogonal tem a vantagem adicional de que os pontos de colocação são escolhidos otimamente e internamente pelo próprio método.

Problemas com oscilação quando colocação ortogonal é aplicada em equações diferenciais podem ser resolvidos aplicando conjuntamente com o método de colocação, o método das características, Acrivos (1956), Bradley e André (1972). Outra alternativa possível é a utilização de um filtro para

eliminar estas oscilações, como proposto por Vasconcelos (1997). Todas estas sugestões podem ser úteis, dependendo principalmente do comportamento do modelo estudado. Mais detalhes sobre o método da colocação ortogonal de uma maneira geral consultar o Apêndice V.

A seguir são apresentados os benefícios e obstáculos dos métodos da diferença finita, colocação ortogonal e colocação ortogonal em elementos finitos conforme Khanna e Seinfeld (1987).

### **Diferenças Finitas**

#### **Benefícios:**

- tem simples construção;
- é facilmente estendida para um caso multivariável;
- solução é estável para gradientes abruptos ou em resposta a picos de concentração e temperatura;
- leva diretamente à representação “state-space”.

#### **Obstáculos:**

- é freqüentemente proibitiva computacionalmente desde que para uma solução precisa requer um grande número de pontos de malha.

### **Colocação Ortogonal**

#### **Benefícios:**

- geralmente necessita de poucos pontos de malha, resultando num modelo de baixa ordem;
- leva geralmente à representação “state-space”.

#### **Obstáculos:**

- pode haver dificuldade com gradientes abruptos ou picos de concentração e temperatura;
- pode levar à dificuldade na modelagem para controle desde que as entradas afetam todos os estados imediatamente.

### **Colocação Ortogonal em Elementos Finitos**

**Benefícios:**

- pode ser considerado para gradientes abruptos se os elementos são escolhidos adequadamente;
- leva diretamente à representação “state-space”.

**Obstáculos:**

- pode ter problemas com a colocação dos elementos, especialmente se a localização dos gradientes abruptos for móvel ou desconhecida.

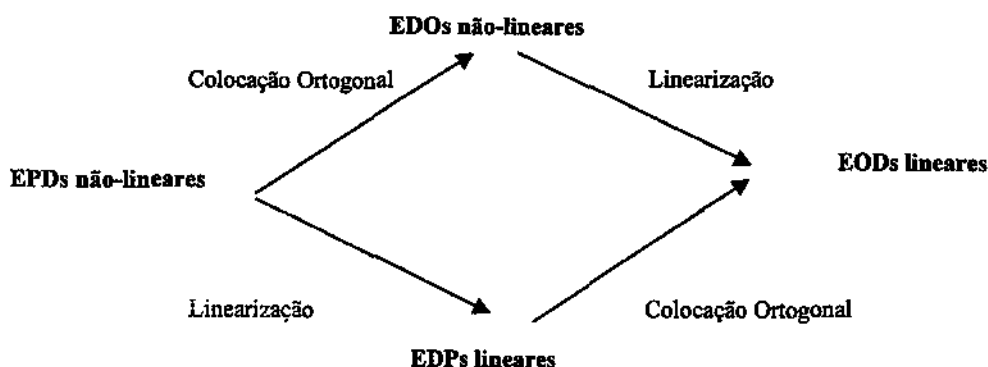
Com relação à bibliografia, as seguintes referências tratam da aplicação e/ou comparação dos métodos: Finlayson (1971), Finlayson (1974), Jutan et al. (1977), Mihael e Iordache (1980), Biscaia Jr. (1980), McGreavy (1983), Segall et al. (1984), Khanna e Seinfeld (1987), Villadsen e Michelsen (1987), Almeida (1987), Kheshgi et al. (1988), McGreavy e Maciel Filho (1989), Luize (1991), Domingues (1992), Biscaia Jr. (1992), Kwong (1993), Rocco Junior (1995), Rice e Do (1995), Aguiar et al. (1997) e Pinto e Lage (1997).

Em se tratando do desenvolvimento do método da colocação ortogonal e colocação ortogonal em elementos finitos tem-se as seguintes referências: Villadsen (1970), Finlayson (1972), Finlayson (1974), Carey e Finlayson (1975), Villadsen e Michelsen (1978), Finlayson (1980), Holland e Liapis (1983), Davis (1984) e Constantinides (1987).

**III.6.2 - Linearização**

Na simplificação do modelo do reator catalítico de leito fixo a técnica da linearização pode ser aplicada com intuito de facilitar a solução do modelo e com isso diminuir o tempo computacional exigido. A técnica da linearização pode ser aplicada antes ou após a aplicação da técnica da colocação ortogonal, resultando com a aplicação de ambas técnicas um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares.

O processo pode ser esquematizado de seguinte maneira:



As expressões são linearizadas em torno das condições de operação do estado estacionário usando série de Taylor de primeira ordem. No caso deste trabalho a linearização foi aplicada na taxa de reação do modelo do reator catalítico de leito fixo. Devido à linearidade do sistema resultante, pode-se, dependendo do caso, tanto utilizar um método numérico para integração, como realizado neste trabalho, ou através da aplicação de técnicas matemáticas gerar uma solução analítica.

Como referência da aplicação das técnicas discutidas num sistema químico, reator catalítico de leito fixo, consultar Jutan et al (1977), Khanna e Seinfeld (1987) e Toledo (1997).

### III.6.3 – Integração Numérica

Com relação a integração numérica dos modelos do reator na variável temporal ou no comprimento axial, o método das linhas em conjunção com a colocação ortogonal, Villadsen e Michelsen (1978), Maciel Filho (1989), mostrou-se ser um procedimento efetivo para a discretização espacial em conjunção com algum método do tipo Gear, por exemplo os programas LSODAR ou DASSL. Para mais detalhes consultar Davis (1984), Schiesser (1991), Silebi e Schiesser (1992), Rice e Do (1995) e Toledo (1997).

### III.7 – Conclusões

A modelagem de reatores tubulares de leito fixo tem sido largamente estudada, apresentando-se modelos com diferentes níveis de sofisticação, capazes de fornecer respostas suficientemente precisas com relação aos fenômenos observados experimentalmente.

Como o objetivo deste trabalho foi desenvolver modelos para aplicação em controle em tempo real, os modelos pseudo-homogêneos, principalmente, os que incorporam as capacidades térmicas do fluido e sólido,  $(\rho C_p)_f$  e  $(\rho C_p)_s$

respectivamente, com diferentes características e que reproduzam de maneira rápida e fácil o comportamento dinâmico do reator foram apresentados. A intenção no estudo de diferentes modelos psuedo-homogêneos, bi e unidimensionais, encontrados na literatura é observar a capacidade de predição do fenômeno da resposta inversa e do ponto quente, e as possíveis diferenças e concordâncias nas simulações dinâmicas destes modelos, permitindo uma melhor compreensão das possibilidades e limitações da aplicação dos mesmos em simulação, controle e otimização.

Neste capítulo também foram apresentados as técnicas de redução utilizadas, permitindo uma boa compreensão das dificuldades e vantagens de implementação destas técnicas ao modelo bidimensional do reator catalítico de leito fixo. Também foram apresentados os métodos numéricos utilizados para simulação dos modelos do reator, ficando para o Capítulo IV os resultados obtidos para as simulações estacionária e dinâmica dos modelos apresentados.

## **CAPÍTULO IV - SIMULAÇÕES ESTACIONÁRIA E DINÂMICA**

### **IV.1 – Introdução**

Neste capítulo apresentam-se os resultados das simulações estacionária e dinâmica dos modelos do reator catalítico de leito fixo estudados para determinadas condições de operação.

Inicialmente são apresentados as figuras que representam o comportamento estacionário, ficando na seqüência as que representam o comportamento dinâmico do reator. Dessa forma, pretende-se neste capítulo ter a compreensão do comportamento estacionário e dinâmico do reator através da solução dos modelos estudados em malha aberta. Isto possibilita conhecer quais parâmetros afetam de forma significativa o desempenho do reator tanto no regime estacionário como dinâmico. Este conhecimento é fundamental para definir estruturas de controle e procedimentos operacionais que levem a um alto desempenho do reator.

### **IV.2 - Regime Estacionário**

Inicializa-se o estudo das simulações do reator avaliando seu comportamento estacionário objetivando conhecer quais parâmetros mais o influenciam para uma determinada condição de operação. Este conhecimento é de grande importância quando se deseja um alto rendimento do reator e uma base sólida para melhor compreender os efeitos destes parâmetros no comportamento dinâmico do mesmo.

Para analisar o comportamento estacionário do reator fez-se o estudo da sensibilidade do modelo do reator frente à variações nas propriedades físicas, coeficientes de transferência, temperatura de refrigeração, pressão, parâmetros de projeto e de operação do reator. Além disso, fez-se também um estudo comparativo do comportamento dos três modelos estudados, possibilitando a observação das diferenças e semelhanças entre os mesmos.

Portanto, esta análise permite um bom entendimento do comportamento do sistema em regime estacionário, além de ajudar na compreensão do comportamento dinâmico apresentado a seguir

Nas figuras apresentadas a seguir, esta especificado o modelo do reator utilizado, e detalhes sobre os valores dos parâmetros de projeto e operação do reator consultar o Apêndice III.

## Efeito da Variação e Não Variação das Propriedades Físicas, Coeficientes de Transferência, Temperatura de Refrigeração e Pressão do Reator

Inicialmente fez-se uma análise do comportamento quando as propriedades físicas, coeficientes de transferência, temperatura do fluido refrigerante e pressão do reator variam e quando são constantes. Isto pode ser observado nas Figuras IV.1 à IV.6.

Nestas figuras observa-se um comportamento qualitativamente semelhante, havendo apenas variação quantitativa entre os mesmos. Isto indica que para estudos onde a precisão dos valores das variáveis é desejada, deve-se levar em conta as variações das propriedades físicas, coeficientes de transferência, temperatura do fluido refrigerante e pressão do reator, se não resultados imprecisos podem ser obtidos, afetando principalmente o projeto reator.

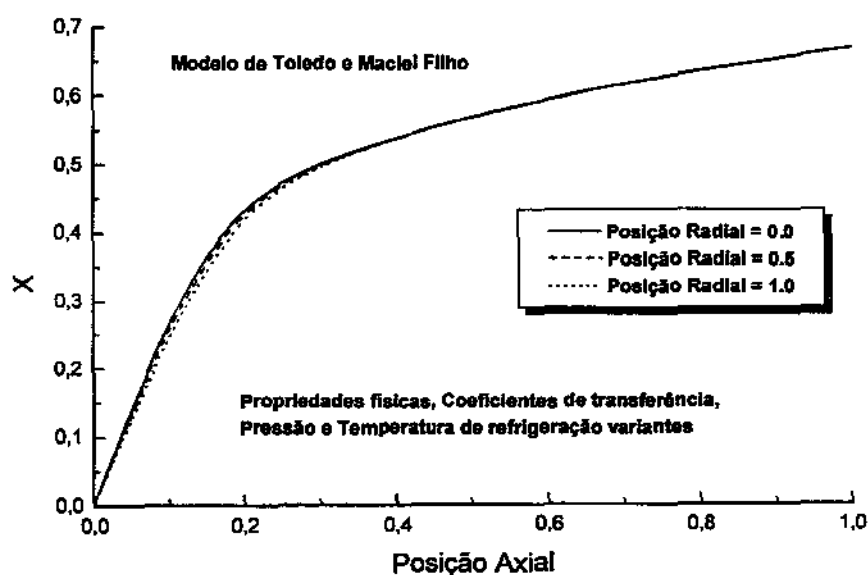


Figura IV.1 - Perfil Estacionário da Conversão do Reator



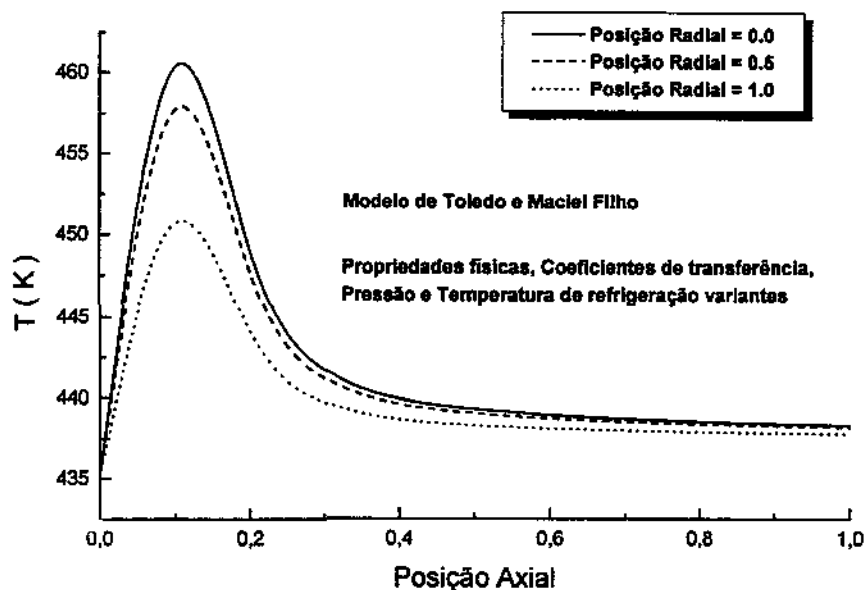


Figura IV.2 - Perfil Estacionário da Temperatura do Reator

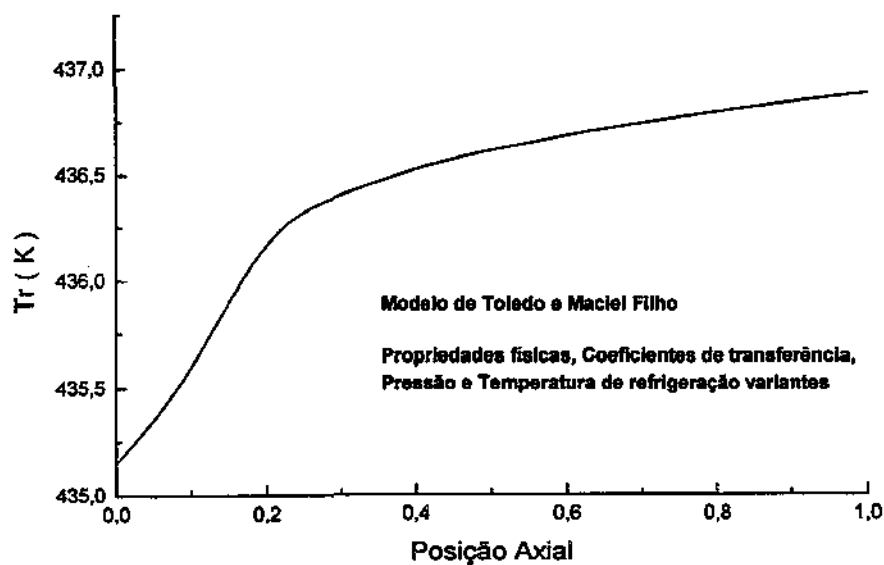


Figura IV.3 - Perfil Estacionário da Temperatura de Refrigeração do Reator

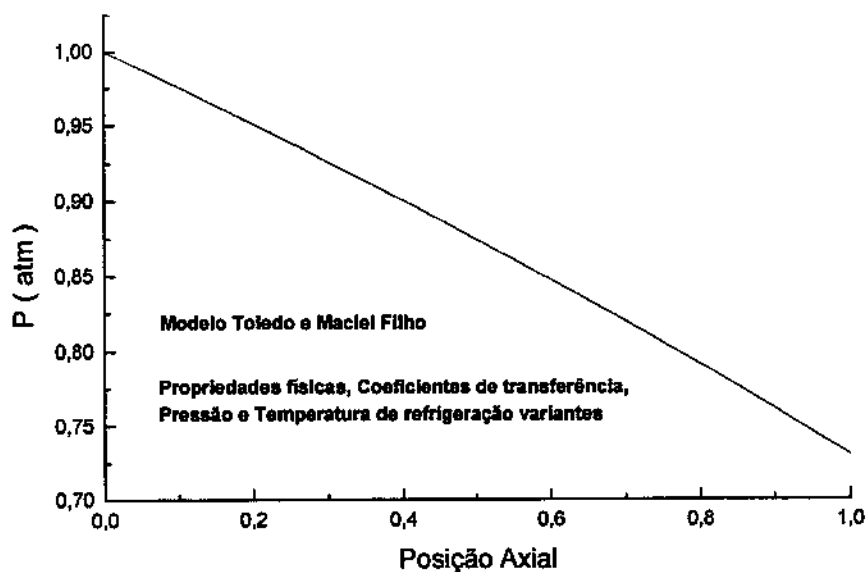


Figura IV.4 - Perfil Estacionário da Pressão do Reator

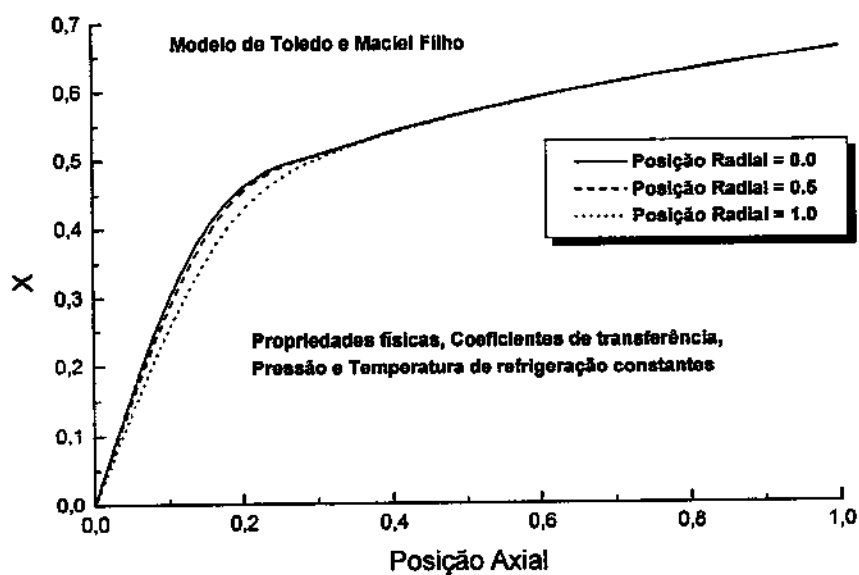


Figura IV.5 - Perfil Estacionário da Conversão do Reator

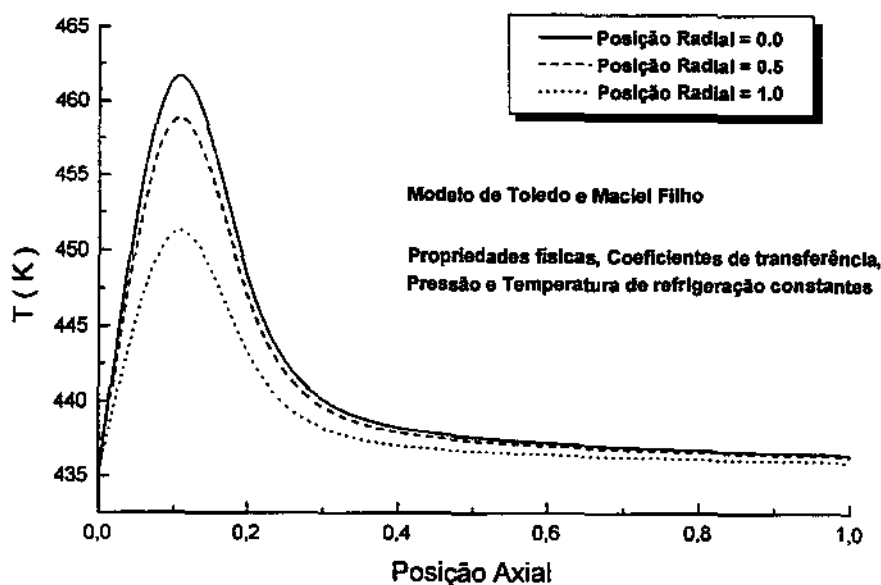


Figura IV.6 - Perfil Estacionário da Temperatura do Reator

### Análise das Diferenças dos Três Modelos Estudados

Com relação aos três modelos estudados, as Figuras de IV.7 à IV.8 mostram o comportamento dos mesmos, indicando que há diferenças entre eles, sendo necessário um conhecimento prévio do sistema estudado para definir qual modelo se adapta melhor a situação real de operação do reator em regime estacionário. No entanto, de maneira qualitativa pode-se dizer que os modelos têm comportamentos parecidos, embora, por exemplo, a magnitude e a posição de ocorrência do ponto quente do reator sejam diferentes.

Deve-se ressaltar também que o modelo baseado em Jutan et al. (1977) e o modelo pseudo-homogêneo clássico são semelhantes para o regime estacionário. Portanto, nas Figuras IV.7 à IV.8 só é apresentado os modelos de Toledo e Maciel Filho e Jutan et al.

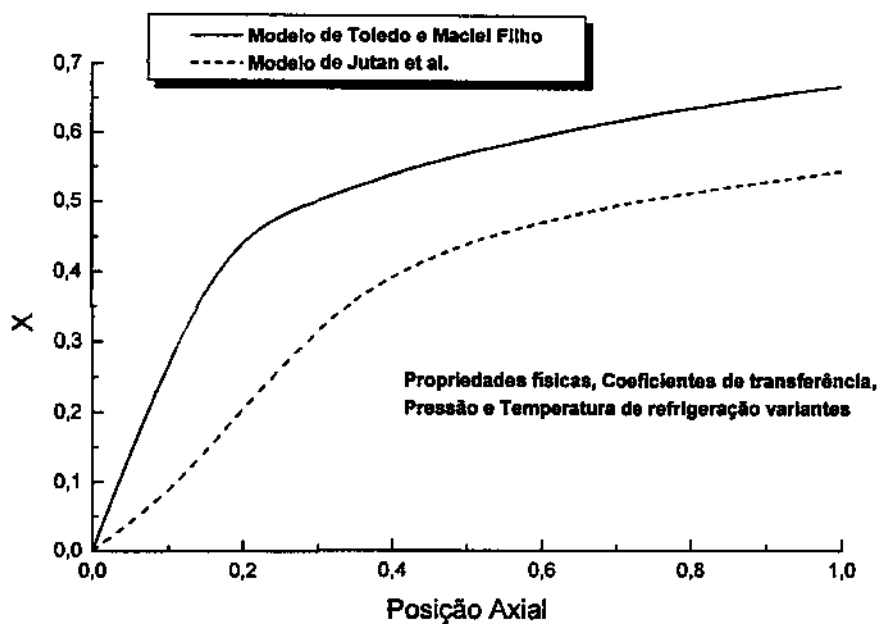


Figura IV.7 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

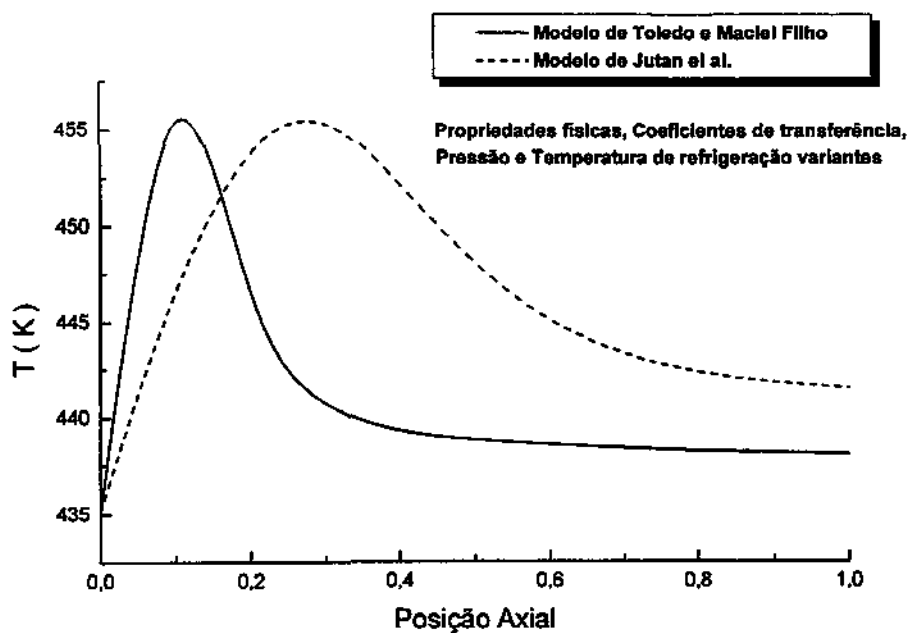


Figura IV.8 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

## **Análise da Influência dos Parâmetros de Operação**

Na seqüência do trabalho foi realizado o estudo da sensibilidade utilizando o modelo de Toledo e Maciel Filho frente à variações nos seguintes parâmetros de operação:

- $T_{fo}$  = temperatura de alimentação, K;
- $T_{ro}$  = temperatura do fluido refrigerante, K;
- $R$  = razão de alimentação de ar/ etanol;
- $p_o$  = pressão da alimentação do reator, atm;
- $G_i$  = velocidade de fluxo mássico intersticial,  $\text{kg/m}^2 \cdot \text{h}$ ;
- $u_R$  = velocidade do fluido refrigerante, m/h.

Pela observação das Figuras de IV.9 à IV.20, pode-se concluir facilmente que todos os parâmetros, exceto  $u_R$ , tem um efeito significativo sobre os perfis do reator, mostrando que a escolha destes parâmetros tem importância capital sobre o comportamento do reator.

Deve-se também ressaltar que a magnitude e a característica dos perfis obtidos podem variar conforme os parâmetros padrões escolhidos sobre o qual se efetua o estudo da sensibilidade paramétrica. O estudo da sensibilidade dos modelos pseudo-homogêneo clássico e de Jutan et al. não foram apresentados, pois levam a conclusões qualitativamente semelhantes que as apresentadas pelo modelo de Toledo e Maciel Filho.

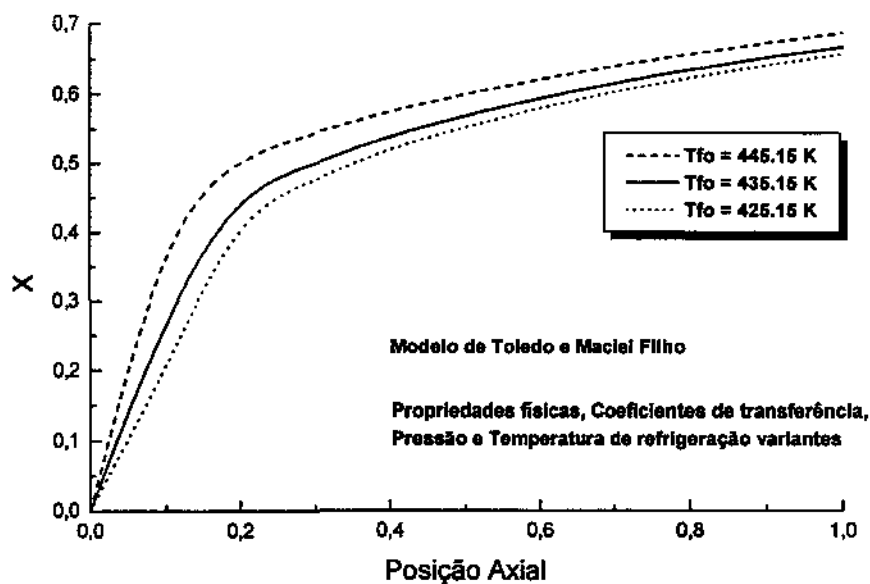


Figura IV.9 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

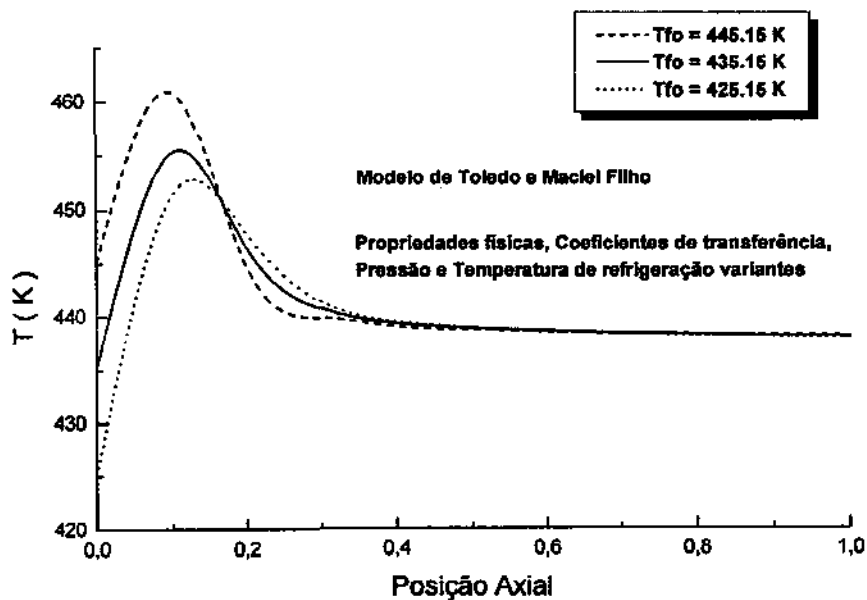


Figura IV.10 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

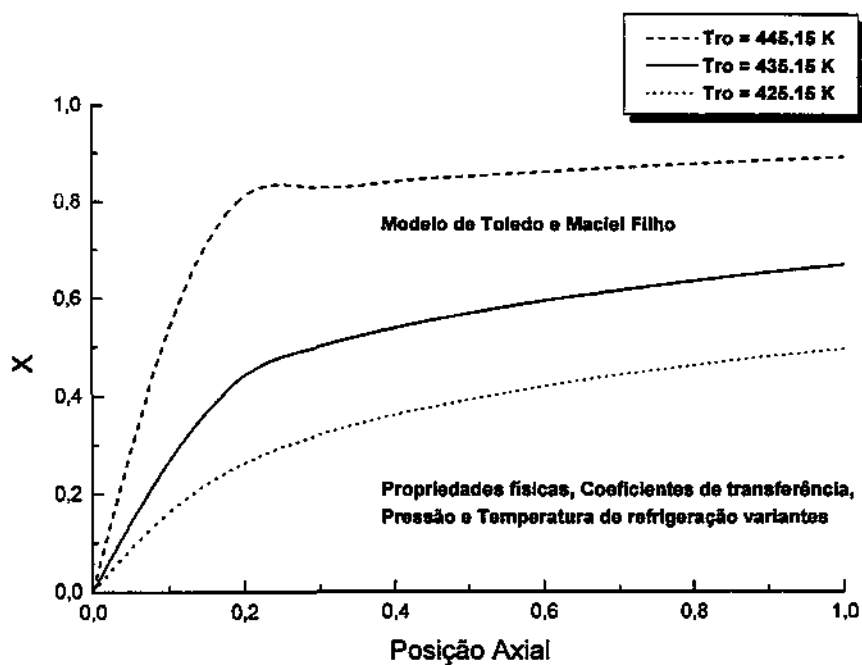


Figura IV.11 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

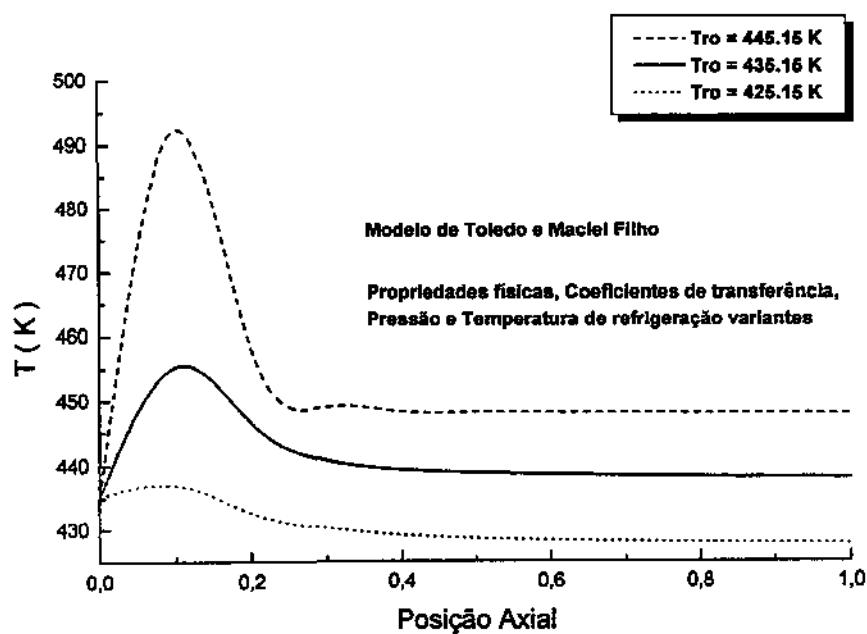


Figura IV.12 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

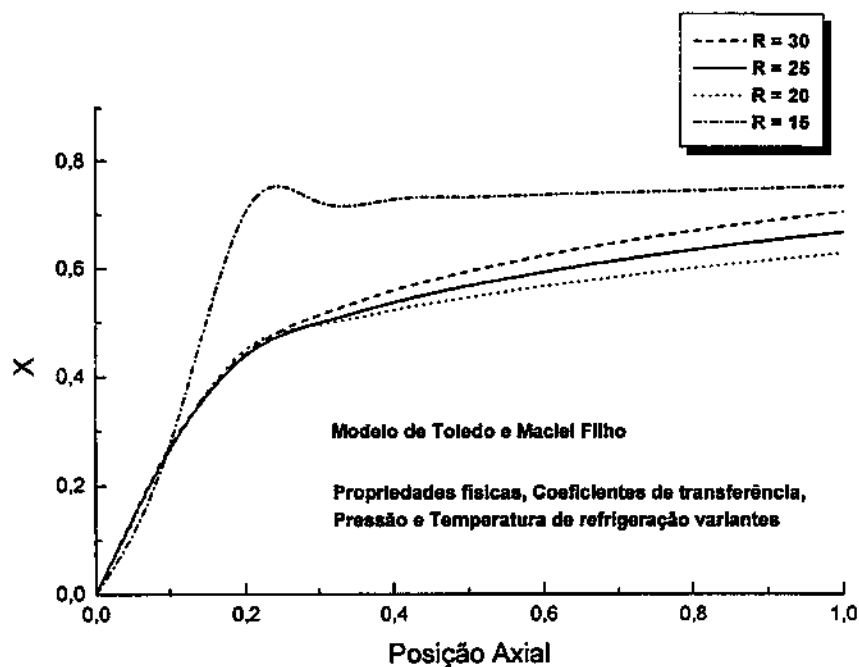


Figura IV.13 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

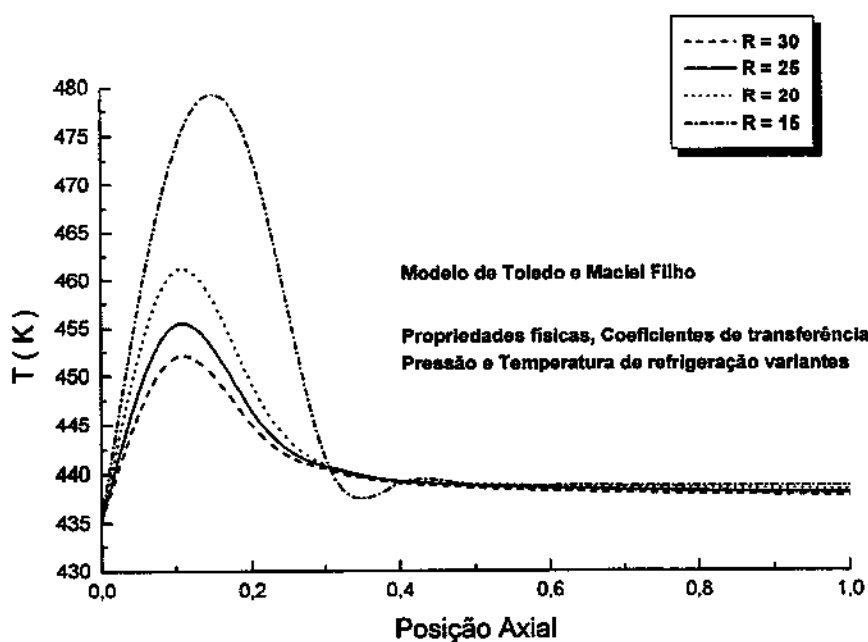


Figura IV.14 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator



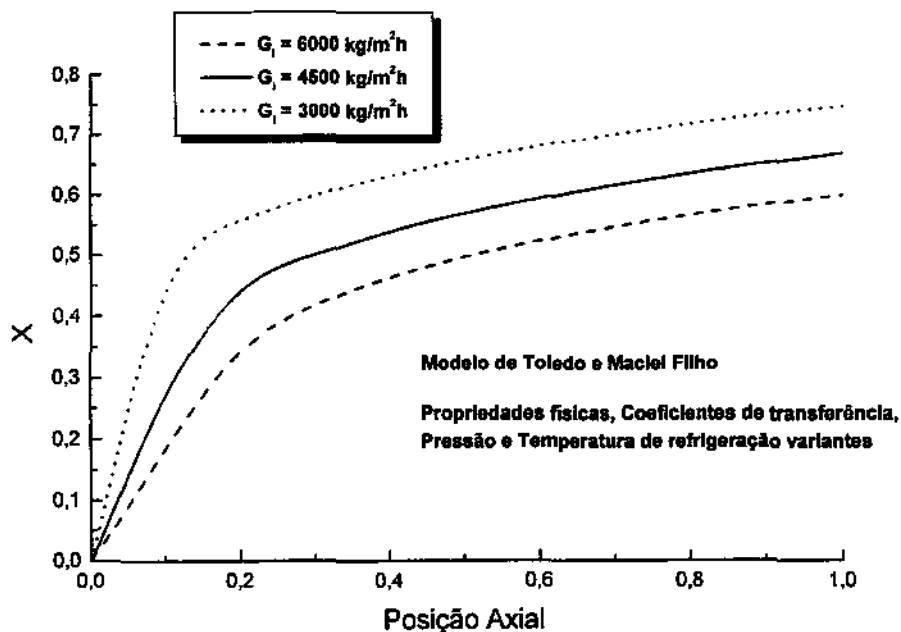


Figura IV.15 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

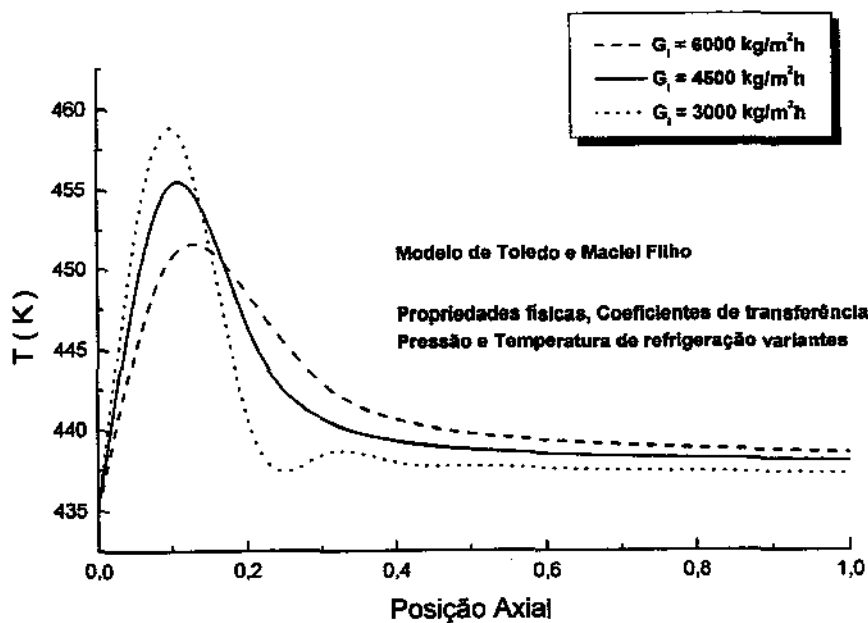


Figura IV.16 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

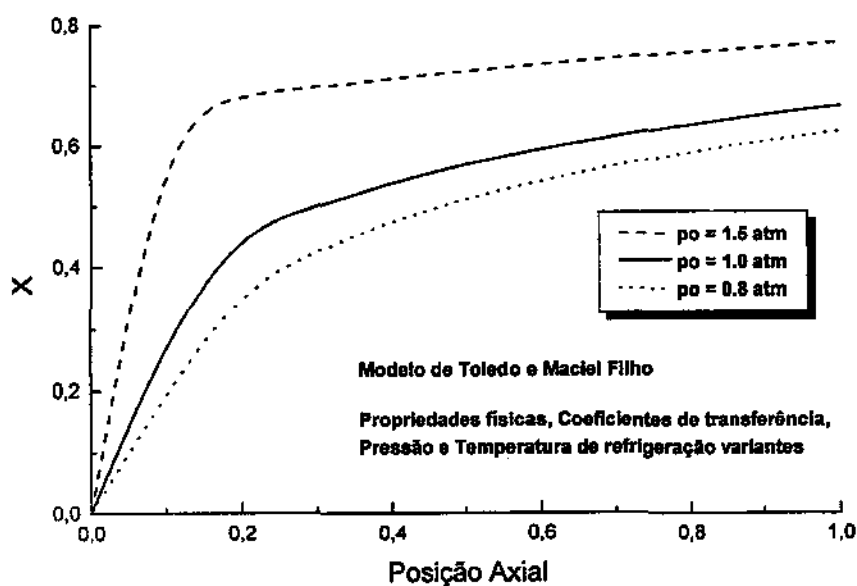


Figura IV.17 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

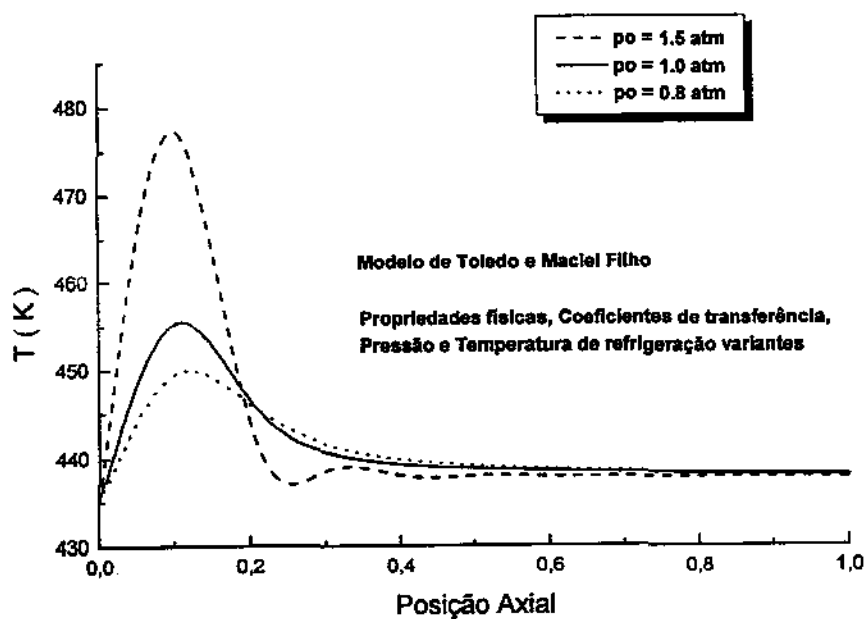


Figura IV.18 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

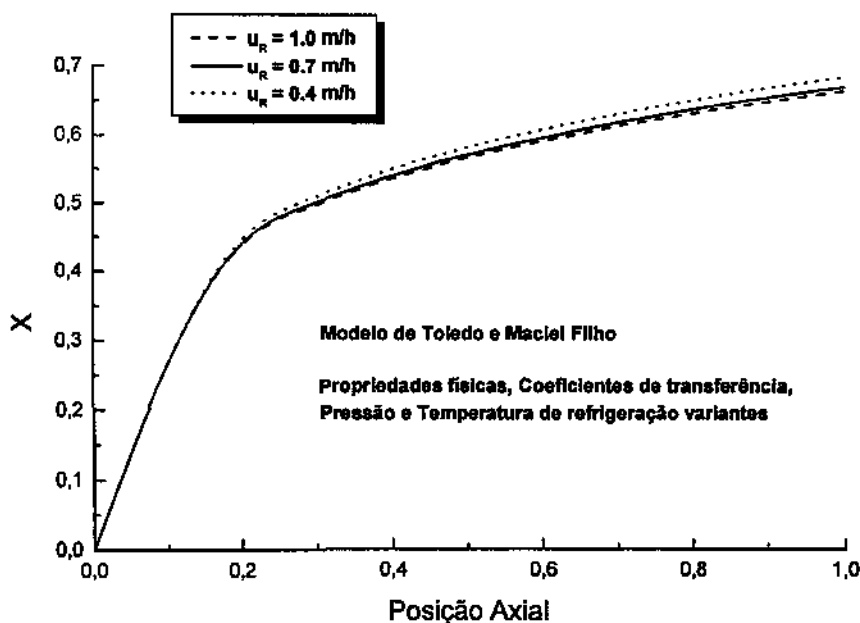


Figura IV.19 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

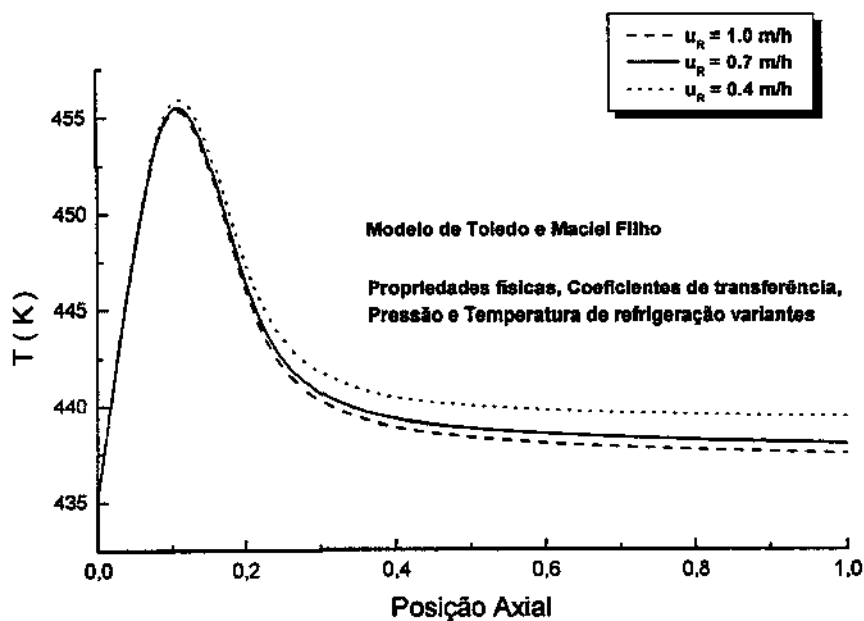


Figura IV.20 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

## **Análise da Influência dos Parâmetros de Projeto**

Para finalizar fez-se o estudo da sensibilidade do modelo frente à variações nos parâmetros de projeto do reator. As variações foram efetuadas nos seguintes parâmetros:

- $D_t$  = diâmetro do reator, m;
- $D_p$  = diâmetro da partícula de catalisador, m;
- $L$  = comprimento do reator, m.

Novamente observa-se pelas Figuras de IV.21 à IV.26 que todos estes parâmetros influenciam o comportamento do reator, e que portanto, cuidado deve-se ter na escolha dos mesmos para conseguir o desempenho desejado do reator.

Com relação as figuras IV.25 e IV.26 relacionadas ao efeito da variação do comprimento do reator, estas mostram que o aumento ou diminuição do comprimento somente trunca ou amplia os perfis de conversão e temperatura do reator. Deve-se ressaltar que a variação do comprimento do reator não altera a posição do ponto quente do mesmo. Pela observação destas figuras conclui-se que a variação do diâmetro do reator e da partícula de catalisador influenciam mais significativamente o comportamento do reator que a variação do comprimento.

A escolha adequada destes parâmetros pode ser devidamente realizada através de procedimento de otimização, Stinghen (1998), porém não foi o objetivo deste trabalho.

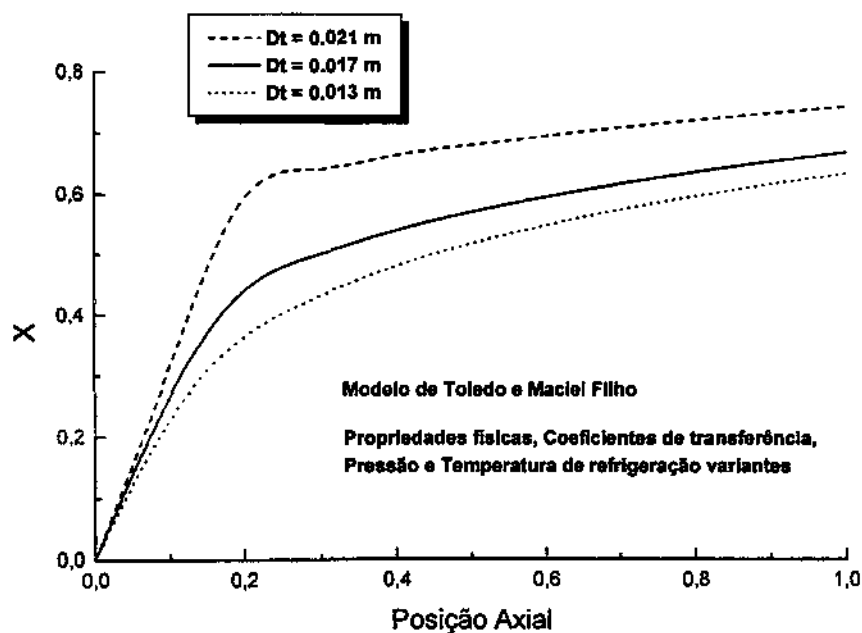


Figura IV.21 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

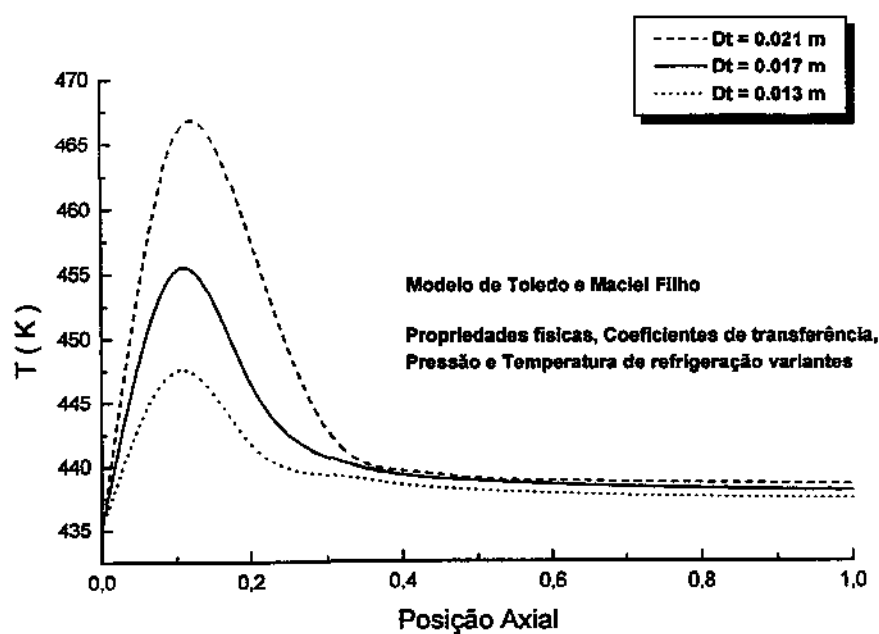


Figura IV.22 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

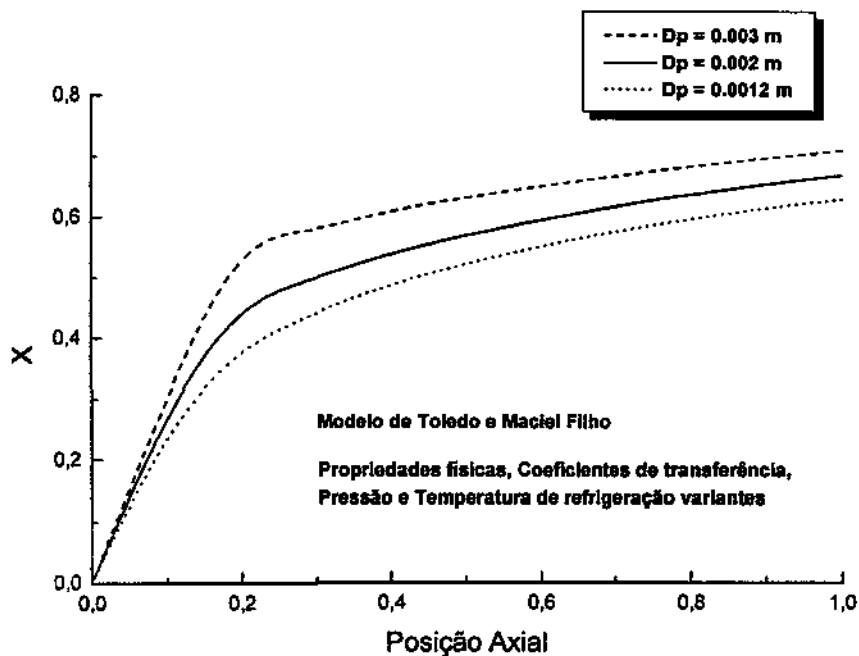


Figura IV.23 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

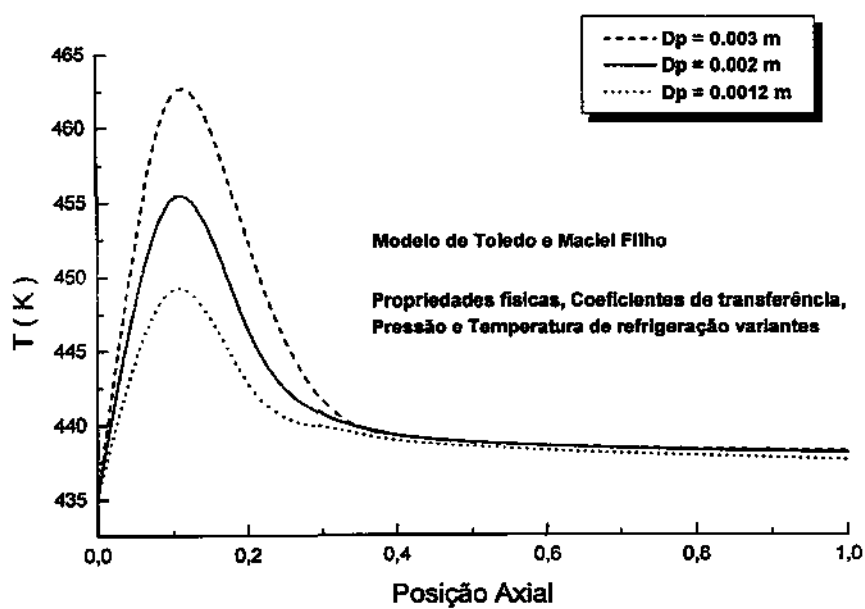


Figura IV.24 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

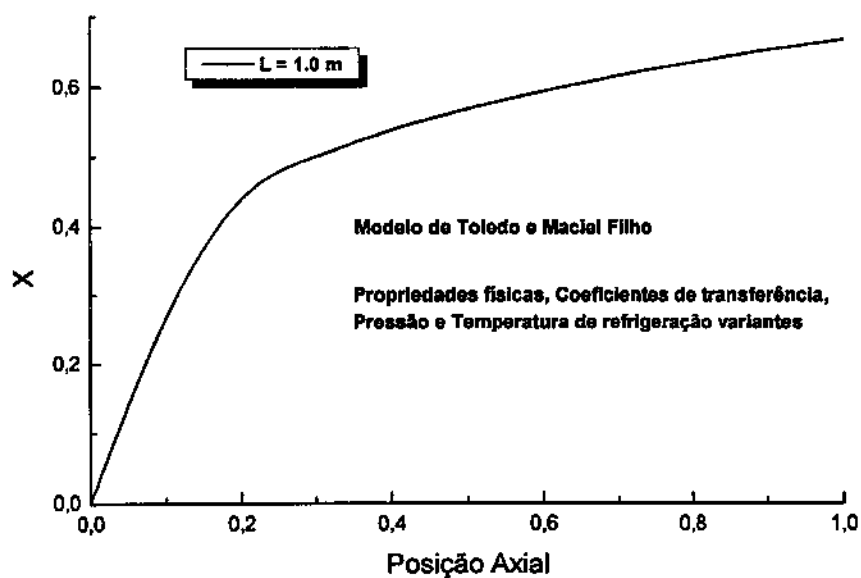


Figura IV.25 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

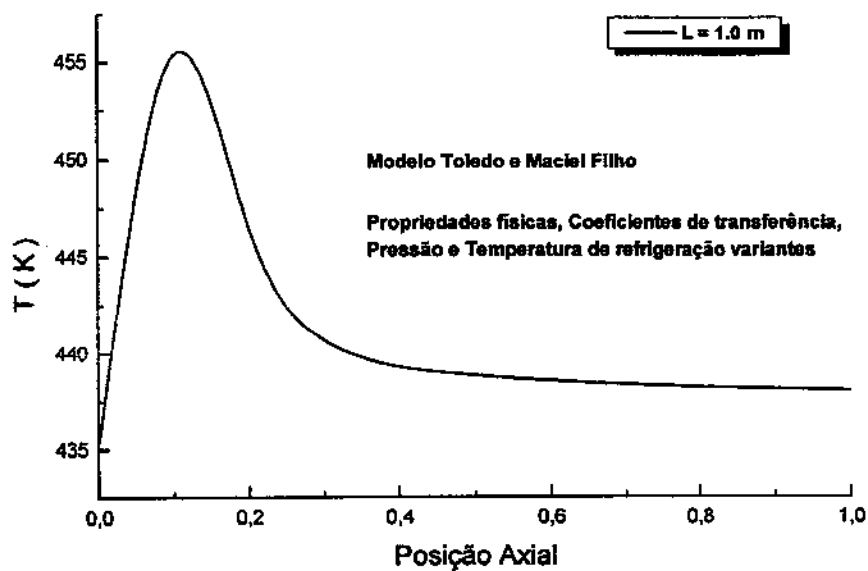


Figura IV.26 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

## Conclusões

A análise estacionária do reator mostrou que todas as questões estudadas são de grande importância para entender o comportamento do reator e avaliar o impacto dos parâmetros e dados de projeto no seu desempenho. Também mostrou que é necessário obter informações a respeito do potencial dos diferentes modelos assim como estes se comportam com relação aos parâmetros e condições operacionais. No entanto, de maneira geral para o regime estacionário os modelos estudados apresentaram comportamentos semelhantes qualitativamente, havendo necessidade de dados experimentais para definir qual modelo é mais representativo para o comportamento estacionário do reator. Caso nenhum modelo represente adequadamente o regime estacionário, deve-se tentar utilizar modelos heterogêneos.

Outra questão que deve ser ressaltada é que neste tópico (simulação estacionária) não foram utilizados os modelos reduzidos apresentados no Capítulo III, pois estes modelos normalmente são utilizados para aplicações em controle e otimização em tempo real. Para o cálculo do regime estacionário não há preocupação com o tempo computacional exigido para a solução do modelo, portanto, não há sentido na utilização de modelos reduzidos e sim a utilização de modelos bidimensionais.

No Apêndice II estão apresentados os resultados do comportamento estacionário do reator utilizando a taxa de reação de Moura (1984).



### IV.3 – Regime Transiente

Uma parte muito importante na etapa do projeto de um reator químico e para a definição da sua estratégia de controle é a análise do comportamento dinâmico do reator em malha aberta. Esta análise permite determinar quais variáveis devem ser escolhidas para serem controladas e/ou manipuladas com a finalidade de manter ou alterar o ponto de operação do reator.

Esta análise é feita sobre variáveis importantes do reator e que podem variar conforme modificações nas condições operacionais, ocasionadas por mudanças nas variáveis de entrada.

Frente a isto, fez-se então variações degrau nas variáveis de entrada escolhidas e analisou-se o comportamento das variáveis dependentes, no caso temperatura do reator, conversão, temperatura do fluido refrigerante e pressão do reator, a fim de se determinar o efeito e a sensibilidade destas variáveis dependentes frente às variações impostas.

Esta análise possibilitou a identificação do comportamento crítico de algumas variáveis dependentes frente à variações nas condições de entrada, tais como apresentar um comportamento de resposta inversa ou fortemente não-linear. Quando o sistema apresenta estas características, certamente dificultará o desempenho do controlador, portanto, exigindo estratégias de controle sofisticadas. De fato, se a variável escolhida para manipulação resultar neste comportamento complexo para as variáveis controladas do reator, a estratégia de controle deverá ser projetada com muito mais cuidado para evitar tais instabilidades. Obviamente nesta situação, passa a ser questionável a escolha de variáveis manipuladas que levem a um comportamento dinâmico complexo.

Certamente o fenômeno de resposta inversa é o que causa maiores problemas para implementação de uma malha de controle. Este fenômeno ocorre principalmente devido a diferença das capacidades térmicas do sólido e do fluido reagente no reator catalítico de leito fixo. Este é um fenômeno físico observado na prática. O nome resposta inversa se deve ao fato de que ao se introduzir uma perturbação numa variável de entrada do reator, o comportamento dinâmico da variável dependente analisada inicialmente é contrário do esperado, no entanto, na sequência da análise o comportamento dinâmico muda e volta a ter a trajetória esperada.

Por exemplo, se há um aumento da temperatura de alimentação do fluido reagente,  $T_{fo}$ , espera-se um aumento da temperatura do reator numa determinada posição axial do reator. No entanto, inicialmente a temperatura do reator diminui contrariando o comportamento esperado. Depois de algum

tempo a temperatura do reator começa a aumentar até atingir um valor superior ao da temperatura do reator neste ponto antes do aumento em  $T_{fo}$ . Este comportamento é chamado de resposta inversa, e é uma característica do comportamento dinâmico de muitos reatores catalíticos de leito fixo reportado tanto na literatura com na prática. Este fenômeno, resposta inversa, pode ser explicado por que o catalisador tendo uma capacidade térmica,  $(\rho C_p)_s$ , maior que a do fluido refrigerante,  $(\rho C_p)_f$ , inicialmente absorve o calor introduzido no reator pelo aumento em  $T_{fo}$  e promove a diminuição da temperatura do reator, comportamento não esperado. Entretanto, na sequência devido a reação química extremamente exotérmica que ocorre dentro da partícula de catalisador, há uma liberação de energia para o meio fluido e há o esperado aumento de temperatura do reator. Mais detalhes sobre o fenômeno da resposta inversa consultar McGreavy (1983), McGreavy e Maciel Filho (1989) e Maciel Filho (1989).

Para o presente sistema estudado, as variáveis de entrada escolhidas a serem perturbadas foram as seguintes:

- $T_{fo}$  = temperatura de alimentação dos reagentes, K;
- $T_{ro}$  = temperatura de alimentação do fluido refrigerante, K;
- $T_r$  = temperatura de refrigeração quando constante ao longo do reator, K;
- $R$  = razão de alimentação de ar/etanol;
- $GM (G, G_i)$  = velocidade de fluxo mássico,  $kg/m^2.h$ .

As variáveis analisadas foram a temperatura do reator, conversão, temperatura de refrigeração e pressão radiais médias em cada ponto de colocação axial ao longo do reator. Para facilitar a compreensão do texto dividiu-se o estudo do comportamento dinâmico do reator para o caso dos modelos bidimensional e unidimensional. Também para facilitar a compreensão das figuras de simulação apresentadas a seguir, apresenta-se uma figura da malha de pontos gerados pelo método da colocação ortogonal quando aplicada ao modelo bidimensional, Figura IV.27. As figuras de simulação apresentadas a seguir vão mencionar no seu texto a qual ponto de colocação axial uma determinada curva está associada para facilitar a compreensão dos resultados.

Deve-se ressaltar que os modelos bidimensionais foram simulados utilizando 5 pontos de colocação radiais internos e 7 pontos de colocação axiais internos. Estes números foram escolhidos após extensivos estudos procurando-se obter a mínima realização do sistema. Isto é, uma malha de

discretização com o mínimo de pontos e que possibilita reproduzir o comportamento dinâmico do reator adequadamente.

Ao longo do trabalho serão apresentadas figuras referentes normalmente as variáveis dependentes do reator, por exemplo temperatura, no primeiro, segundo e terceiro pontos de colocação axial. Estes pontos estão representados na Figura IV.27 como  $\Psi_{MZ1}$ ,  $\Psi_{MZ2}$  e  $\Psi_{MZ3}$ , e assim sucessivamente até o sétimo ponto de colocação axial. Estas variáveis  $\Psi_{MZi}$  representam os valores radiais médios nas respectivas posições axiais  $Z_i$ . Portanto, a compreensão da Figura IV.27 é fundamental para o entendimento das figuras dos Capítulos IV, V e VI.

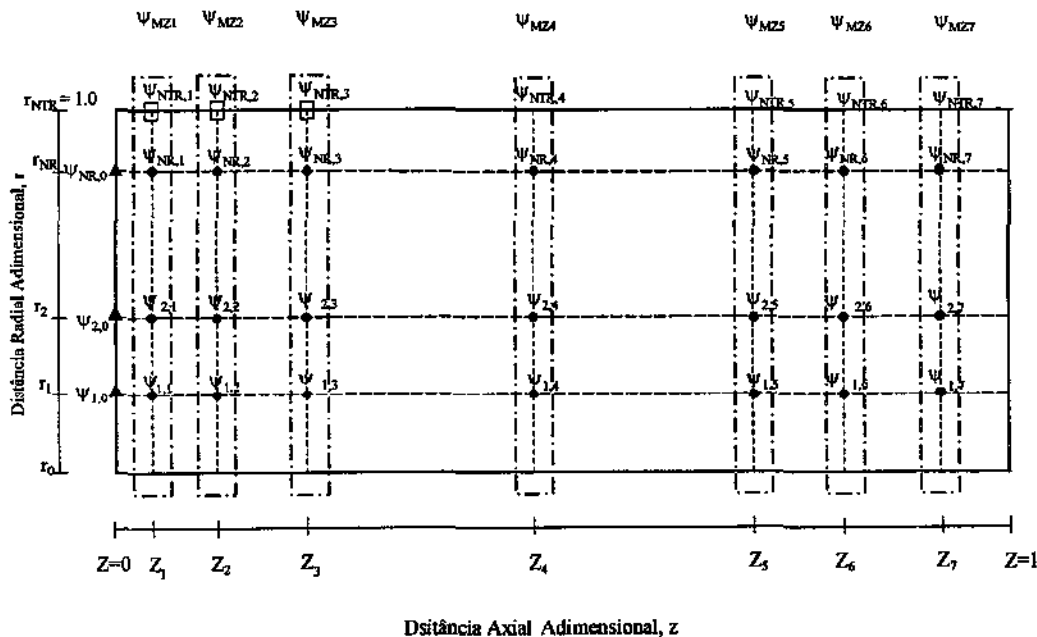


Figura IV.27 – Malha de Pontos Gerados pela Colocação Dupla

Nesta figura os  $Z_i$  ( $i = 1, \dots, 7$ ), equivalem as seguintes posições axiais adimensionais do reator:

$$\begin{aligned} Z_1 &= 0.0254; \\ Z_2 &= 0.129; \\ Z_3 &= 0.297; \\ Z_4 &= 0.5; \\ Z_5 &= 0.703; \\ Z_6 &= 0.871; \\ Z_7 &= 0.975. \end{aligned}$$

### **IV.3.1 – Modelo Bidimensional**

Inicialmente fez-se um estudo do comportamento do modelo do reator no caso onde há variação das propriedades físicas, coeficientes de transferência, temperatura de refrigeração e pressão do reator simultaneamente. Para tanto, utilizou-se o modelo de Toledo e Maciel Filho.

O motivo de representar ao longo deste tópico os perfis basicamente do primeiro, segundo e terceiro pontos de colocação axial é devido ao fato destes pontos serem os mais sensíveis às perturbações, e por este motivo, a reação ocorrer mais fortemente no início do reator, indicando ser esta a região que se deve ter um maior conhecimento para assegurar um melhor desempenho e controle do reator.

Detalhes sobre os valores dos parâmetros de operação e projeto do reator utilizados consultar o Apêndice III.

#### **Efeito de Tfo**

Pode-se observar pelas Figuras de IV.28 à IV.35 o comportamento dinâmico do sistema frente à perturbações degrau positiva e negativa em Tfo.

Das figuras conclui-se que o sistema apresenta um comportamento não linear, inclusive o fenômeno da resposta inversa, mostrando a alta complexidade dinâmica deste sistema frente a perturbações em Tfo. Para fins de controle Tfo não é uma boa opção como variável manipulada, principalmente por ocasionar resposta inversa no sistema.

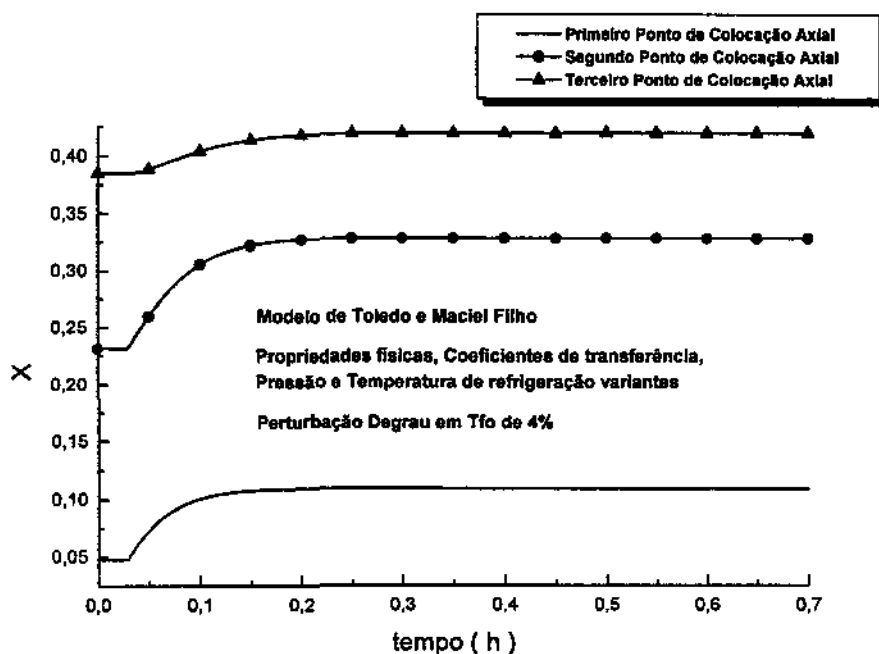


Figura IV.28 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

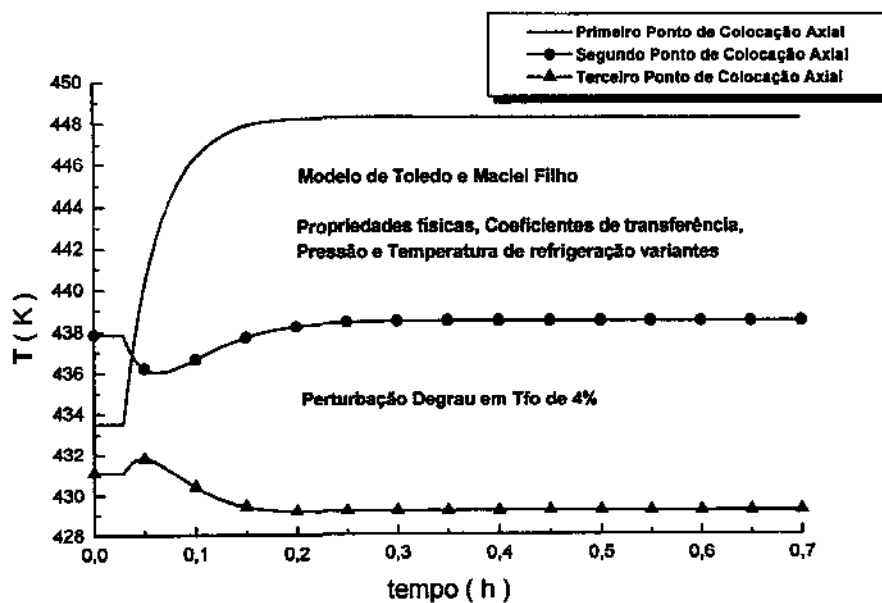


Figura IV.29 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

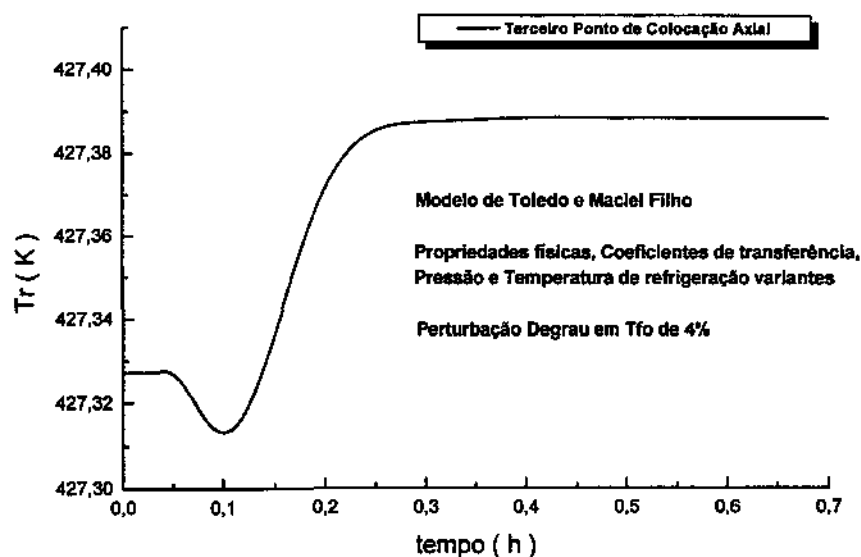


Figura IV.30 – Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator

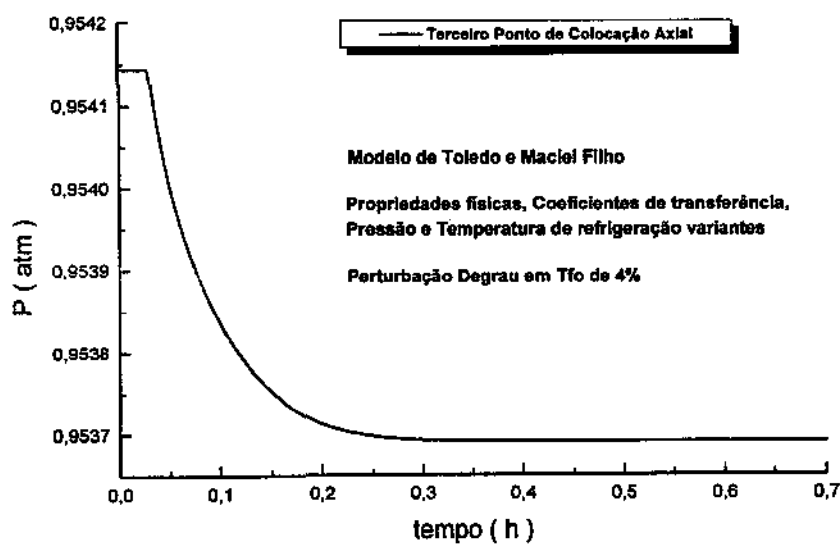


Figura IV.31 – Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator

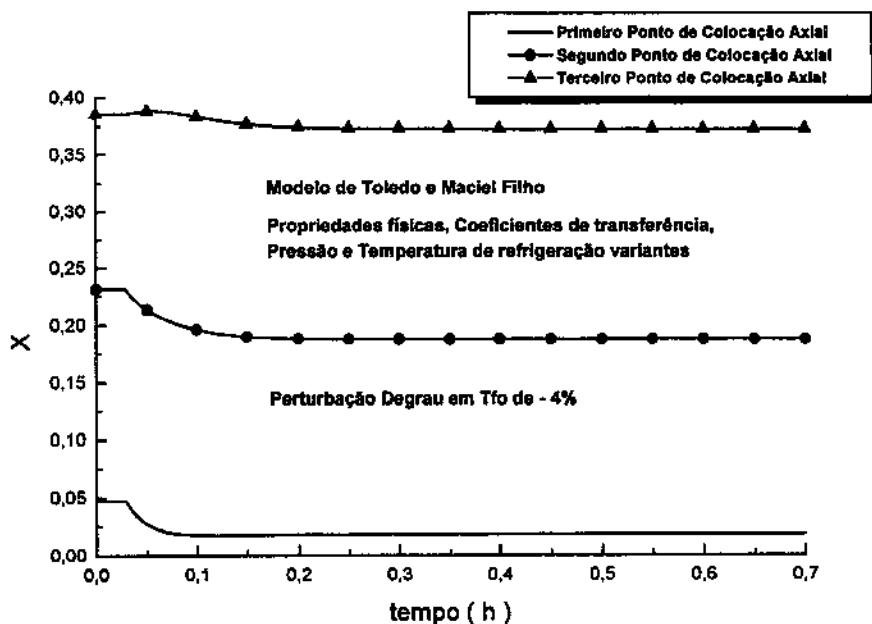


Figura IV.32 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

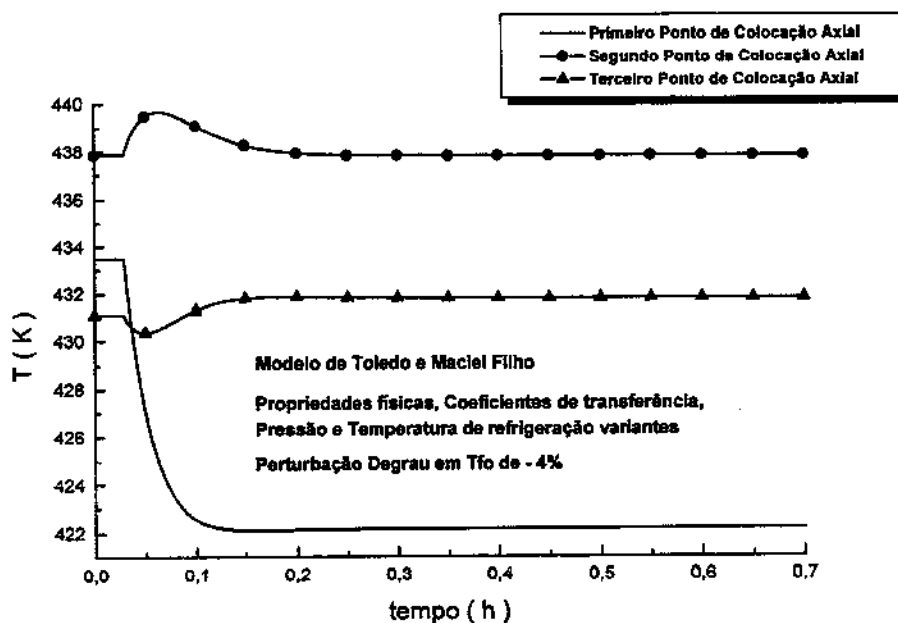


Figura IV.33 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

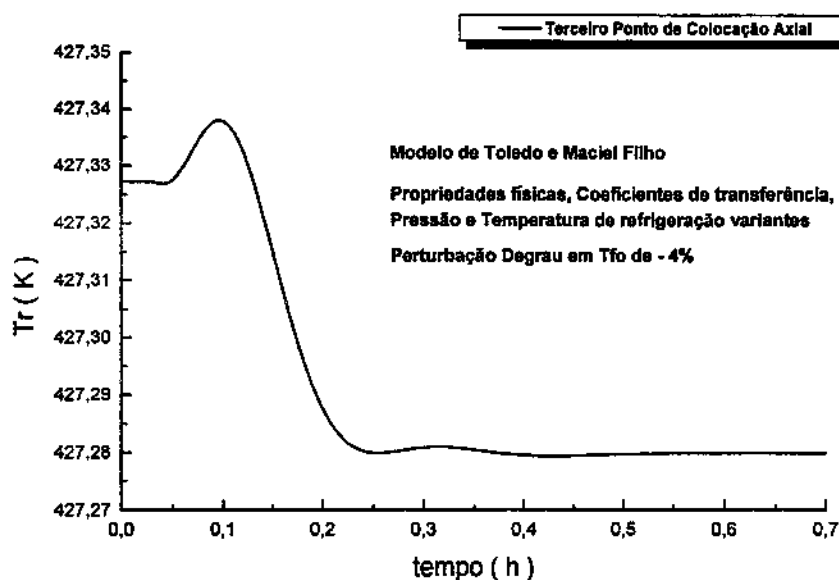


Figura IV.34 – Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator

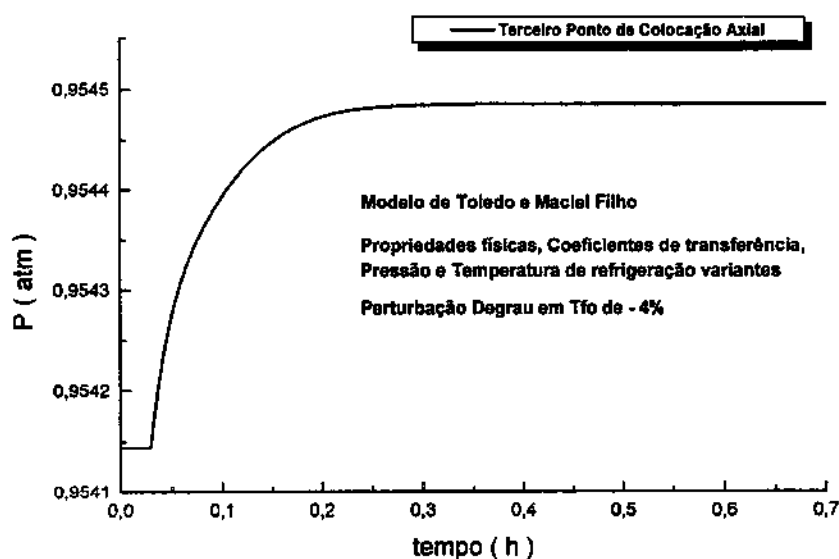


Figura IV.35 – Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator



## Efeito de $T_{ro}$

O comportamento do reator devido à perturbações degraus em  $T_{ro}$  é altamente não linear, inclusive com a ocorrência de resposta inversa como pode ser observado nas Figuras de IV.36 à IV.43. Também pode-se notar uma maior sensibilidade do sistema frente à  $T_{ro}$  do que com relação à  $T_{fo}$ , nas faixas de operação escolhidas, devido ao fato do fluido refrigerante atuar em toda a extensão do reator. Também deve ser ressaltada a dificuldade prática de mudanças repentinas na temperatura do fluido refrigerante, que normalmente se constitui em um volume considerável de fluido com alta capacidade calorífica nos sistemas de porte industrial.

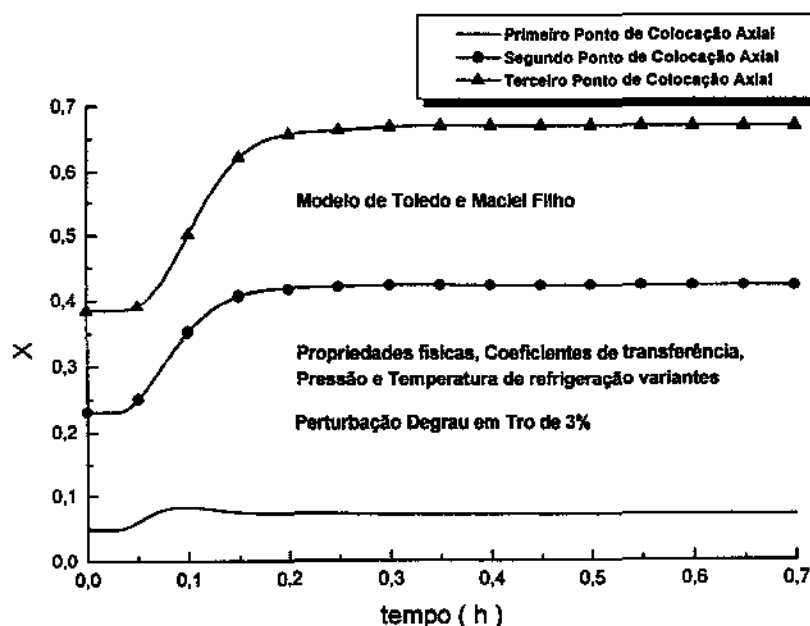


Figura IV.36 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

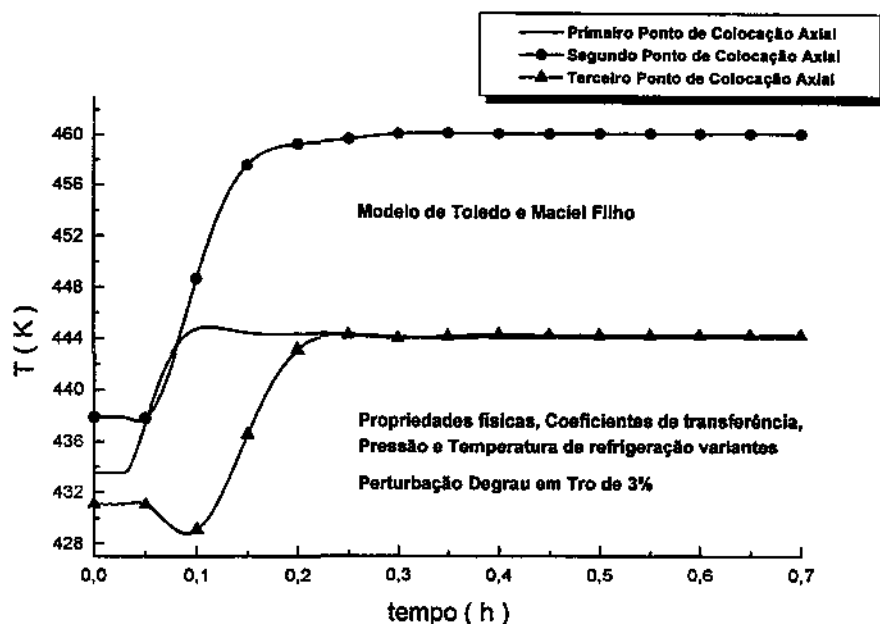


Figura IV.37 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

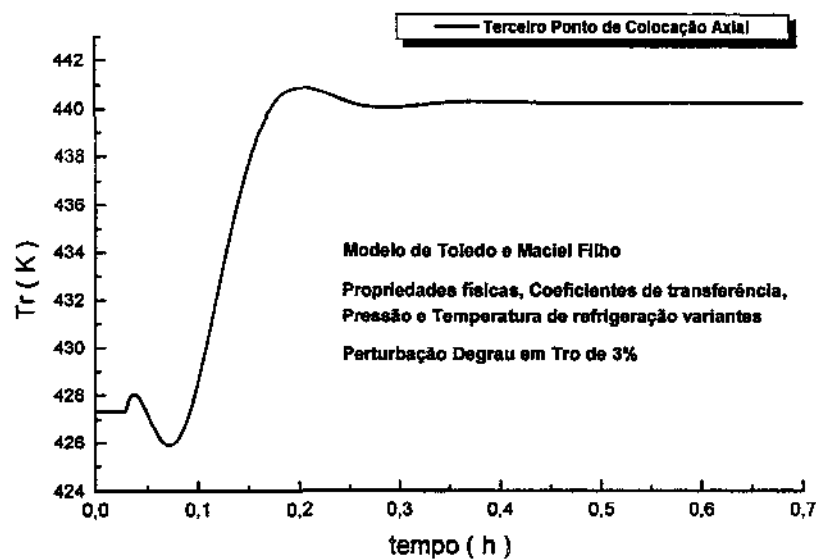


Figura IV.38 – Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator

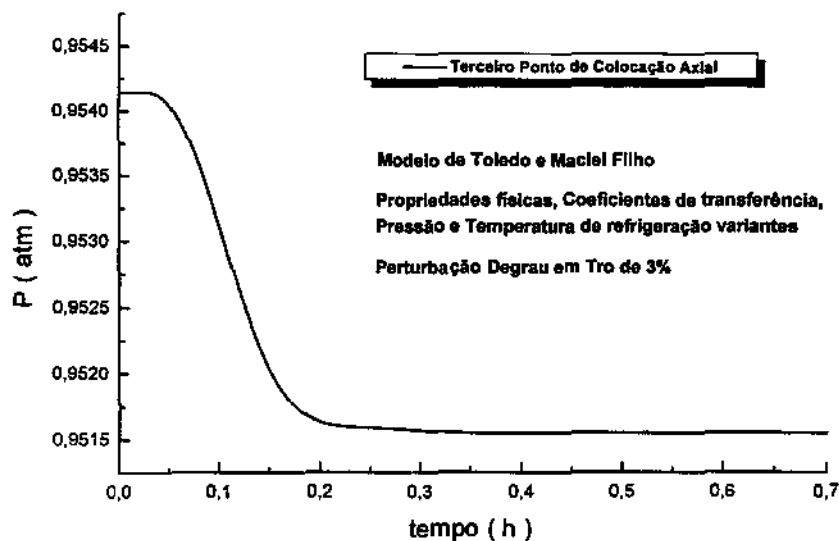


Figura IV.39 – Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator

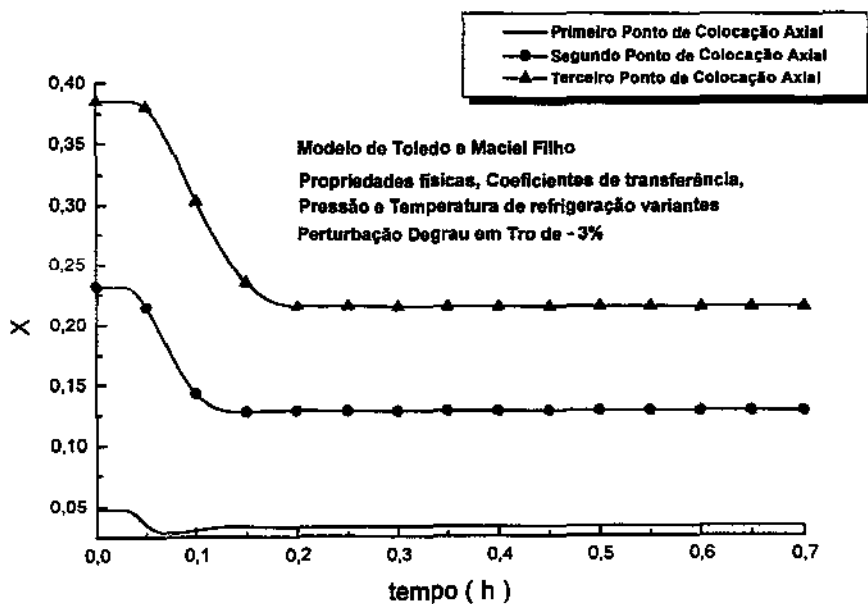


Figura IV.40 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

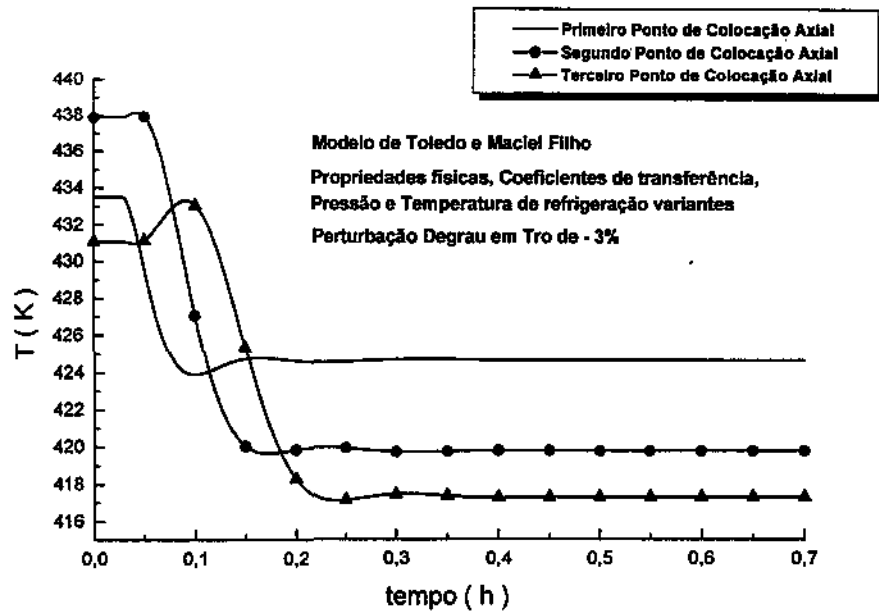


Figura IV.41 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

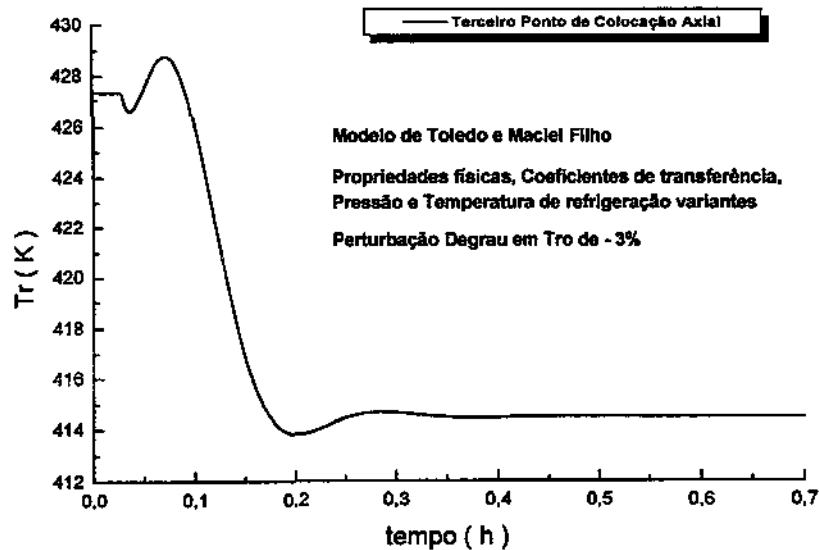


Figura IV.42 – Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator

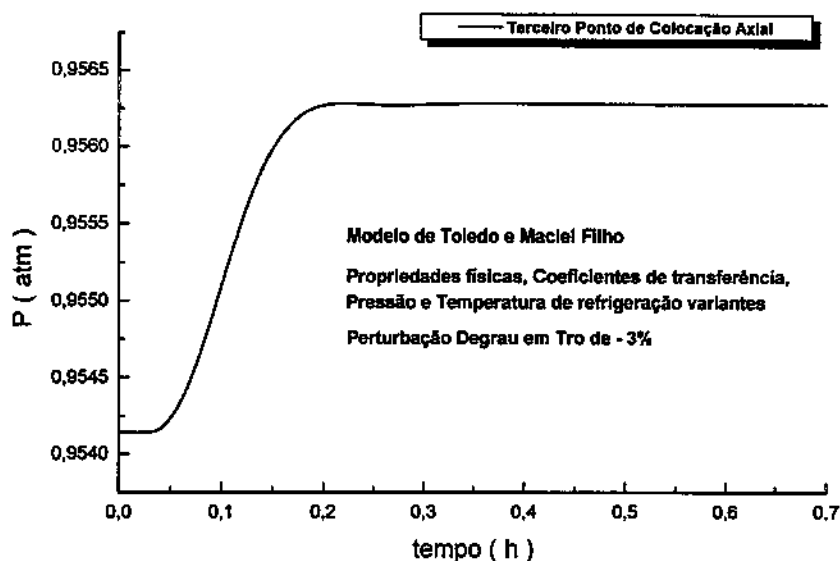


Figura IV.43 – Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator

### Efeito de GM

Pela observação das Figuras de IV.44 à IV.51 , nota-se um comportamento menos complexo e principalmente a baixa sensibilidade do sistema frente às perturbações em GM, evidenciando que se esta variável for utilizada para o controle do reator grandes variações são necessárias serem efetuadas para se obter a resposta desejada do reator.

No entanto, com relação aos perfis da pressão do reator, estes apresentam um comportamento semelhante a uma resposta degrau. Isto é devido provavelmente, a forma da equação dinâmica da pressão em relação ao parâmetro GM. A equação dinâmica da pressão vem de uma análise dimensional, uma maneira simplificada de gerar perfis dinâmicos da pressão ao longo do reator, Maciel Filho (1989). Devido a esta simplificação no modelo e comportamento muito abrupto da pressão em relação a perturbações degraus em GM, optou-se por considerar somente perfis estacionários ou constantes para a pressão no decorrer do trabalho. Evita-se com isso perfis dinâmicos de pressão muito agudos e que, provavelmente, não representem a realidade do reator catalítico de leito fixo.

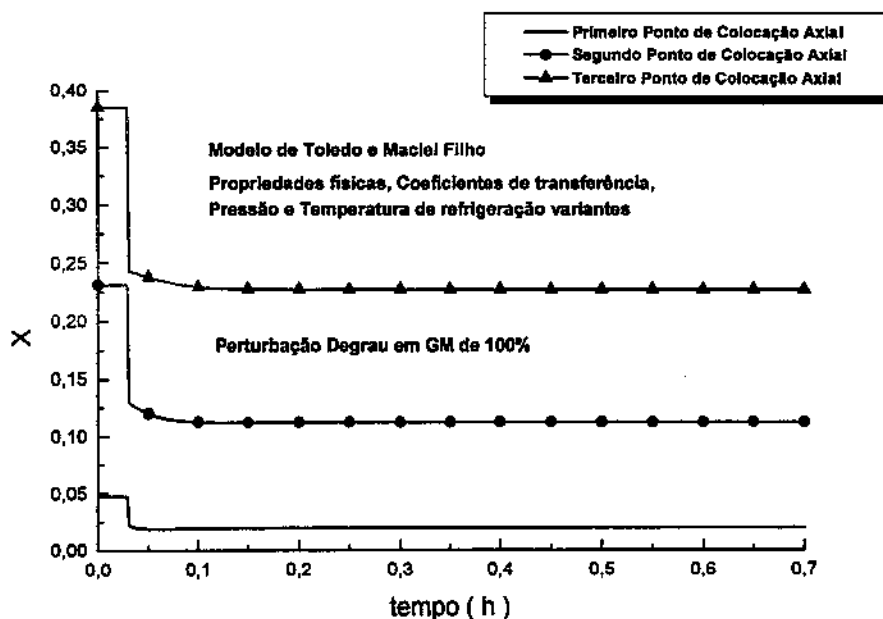


Figura IV.44 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

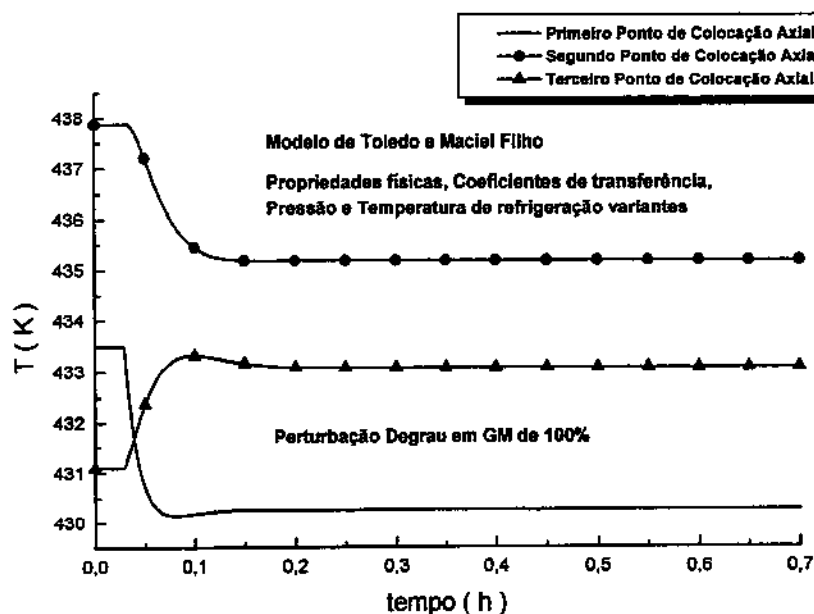


Figura IV.45 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

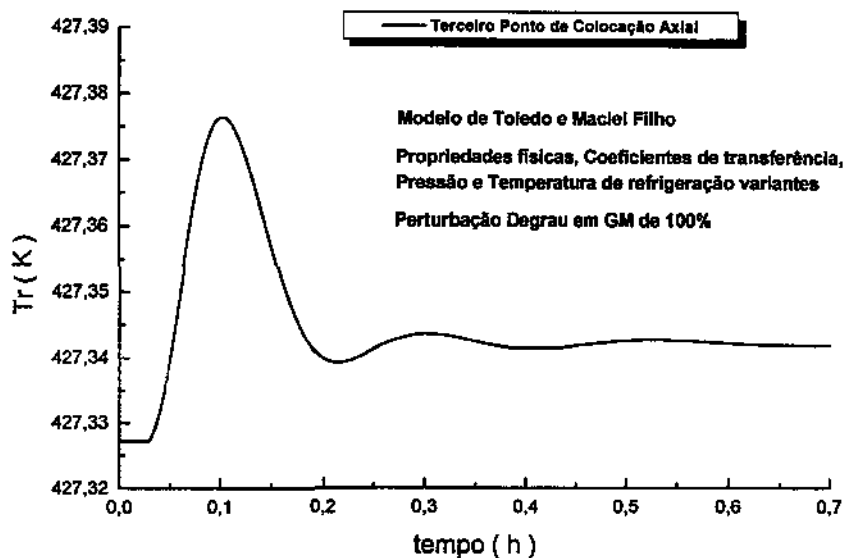


Figura IV.46 – Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator

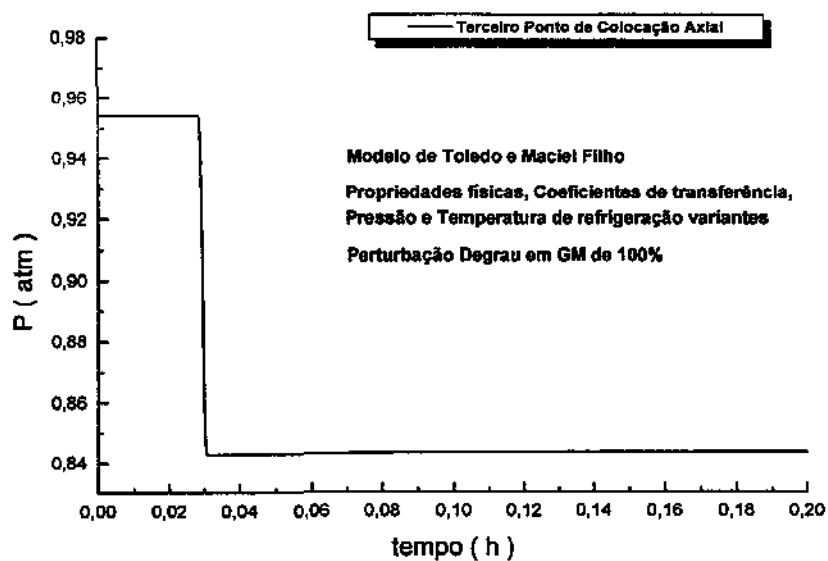


Figura IV.47 – Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator

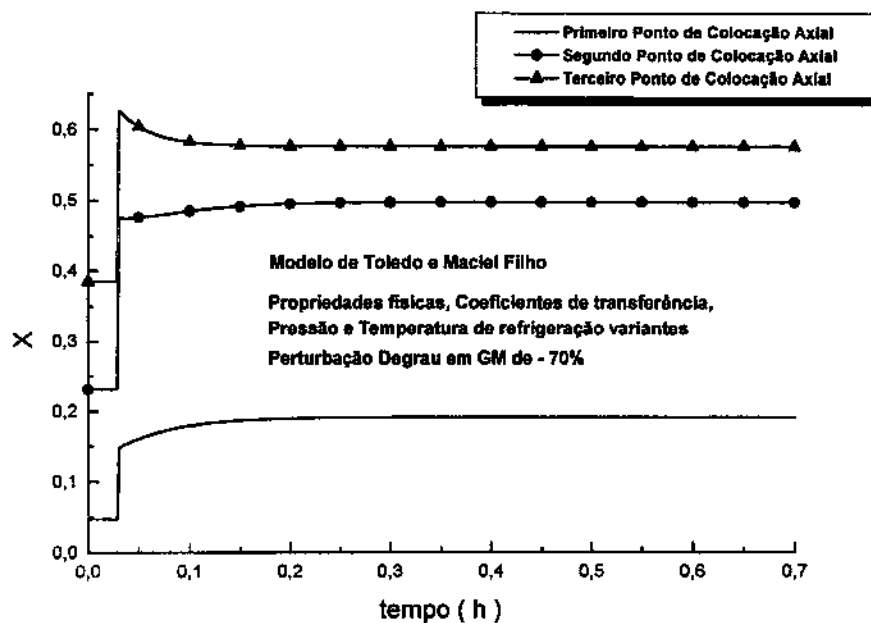


Figura IV.48 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

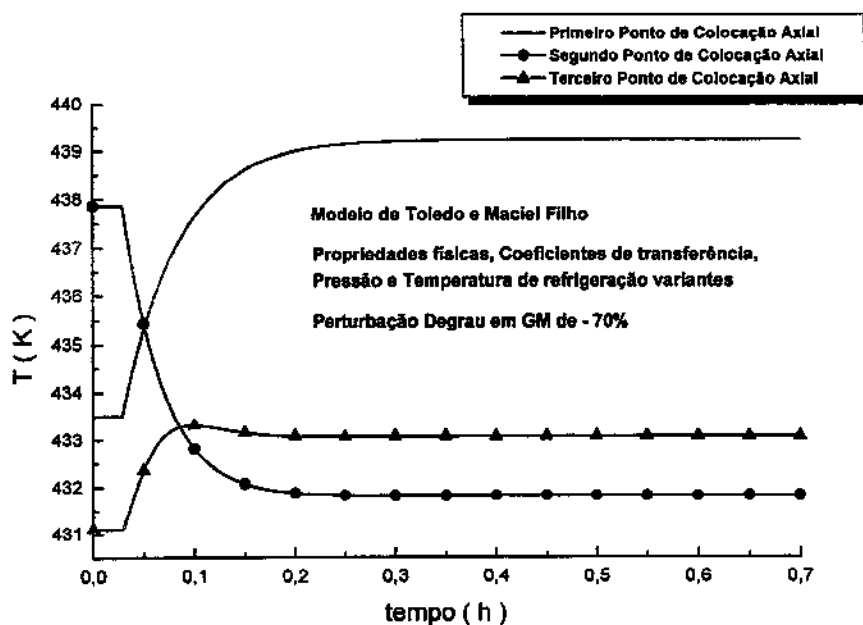


Figura IV.49 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator



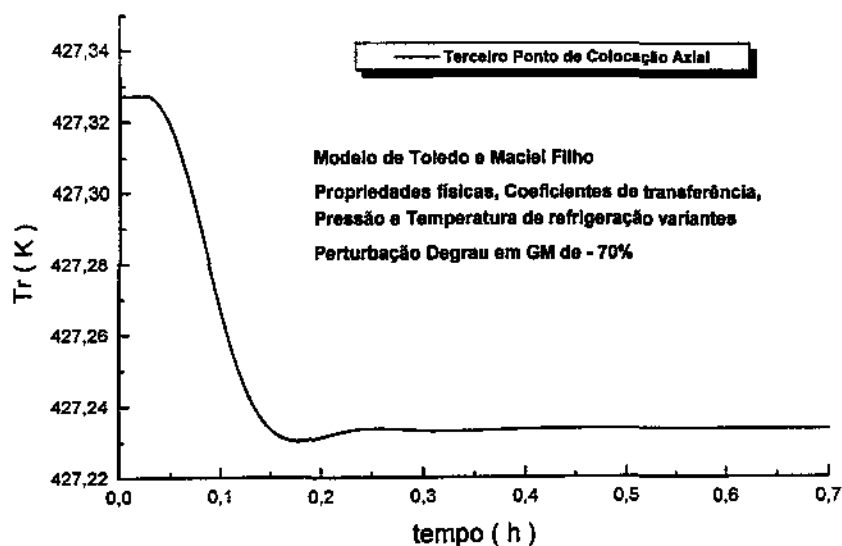


Figura IV.50 – Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração do Reator

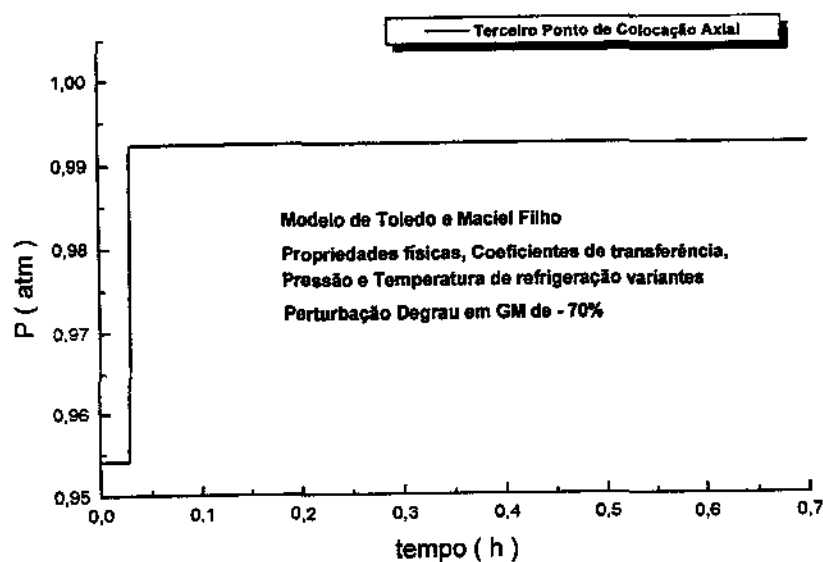


Figura IV.51 – Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator

## Efeito de R

Pela observação das Figuras de IV.52 à IV.59 nota-se um comportamento dinâmico com uma não-linearidade menos acentuada do reator para mudanças nesta variável operacional, R, e com relativamente pouca sensibilidade do sistema para perturbações degrau positivas e grandes para negativas nesta variável operacional.

Este parâmetro possibilita alterações mais significativas na conversão do que na temperatura. Esta característica é importante, pois permite alterar o rendimento do reator sem afetar tanto sua condição térmica, pois um reator catalítico de leito fixo é extremamente sensível à mudanças no seus perfis de temperatura.

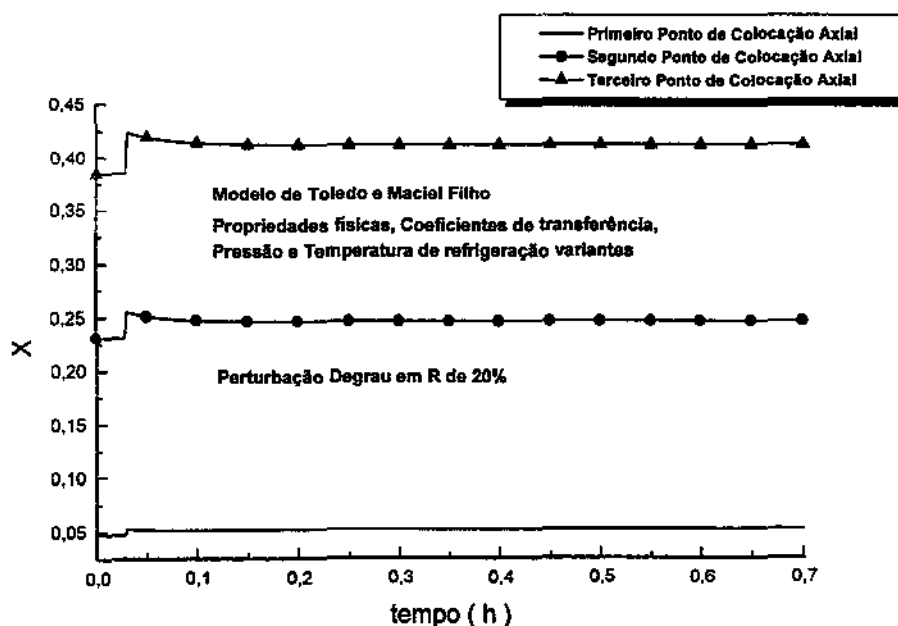


Figura IV.52 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

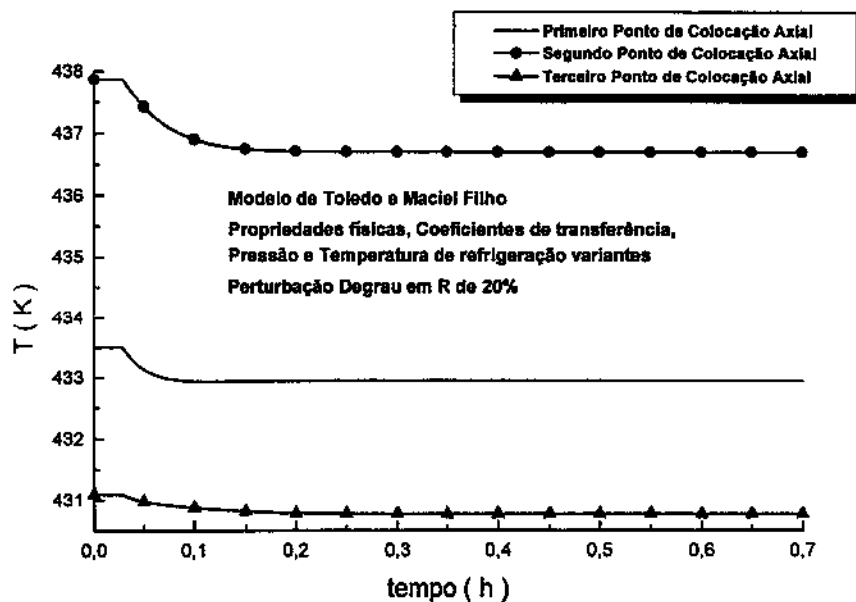


Figura IV.53 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

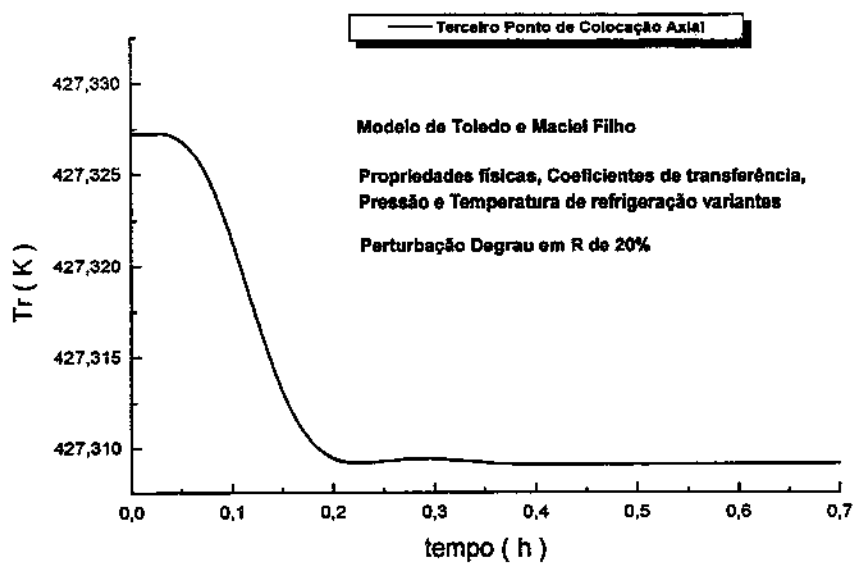


Figura IV.54 – Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator

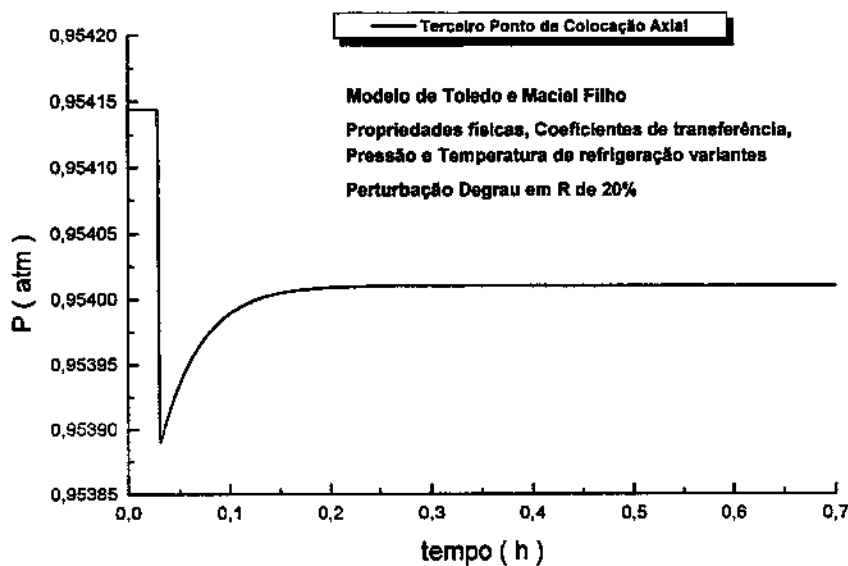


Figura IV.55 – Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator

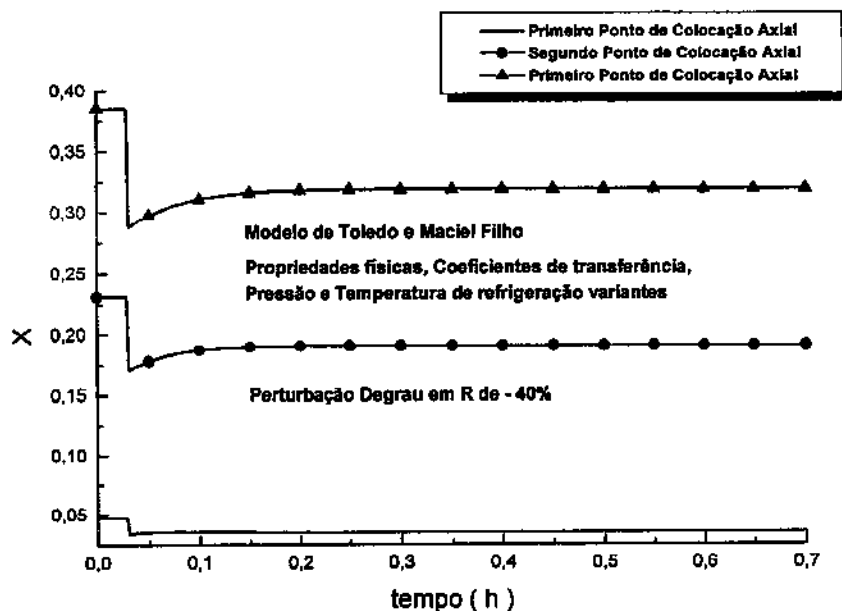


Figura IV.56 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

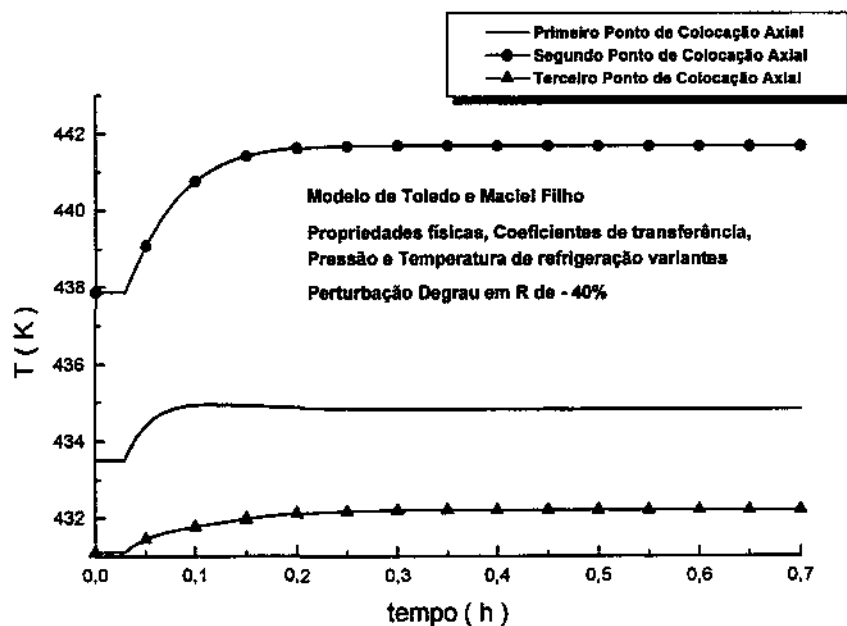


Figura IV.57 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

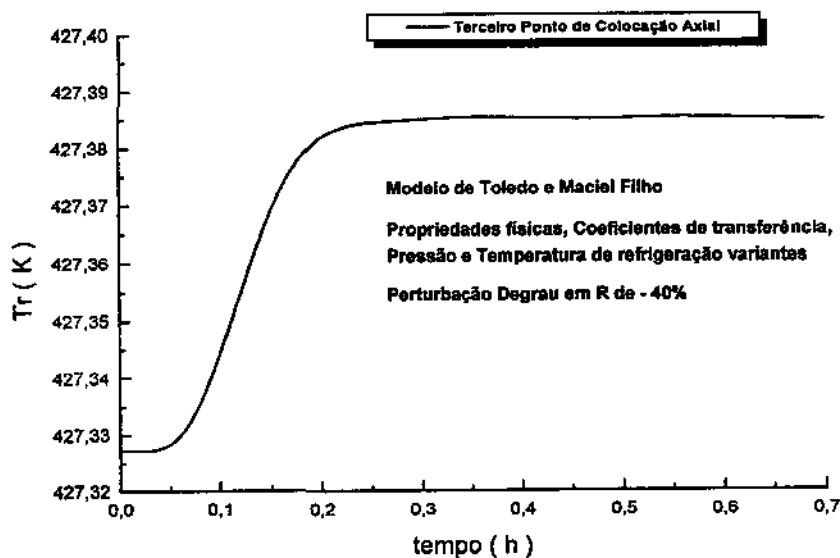


Figura IV.58 – Perfil Dinâmico da Temperatura de Refrigeração Axial do Reator

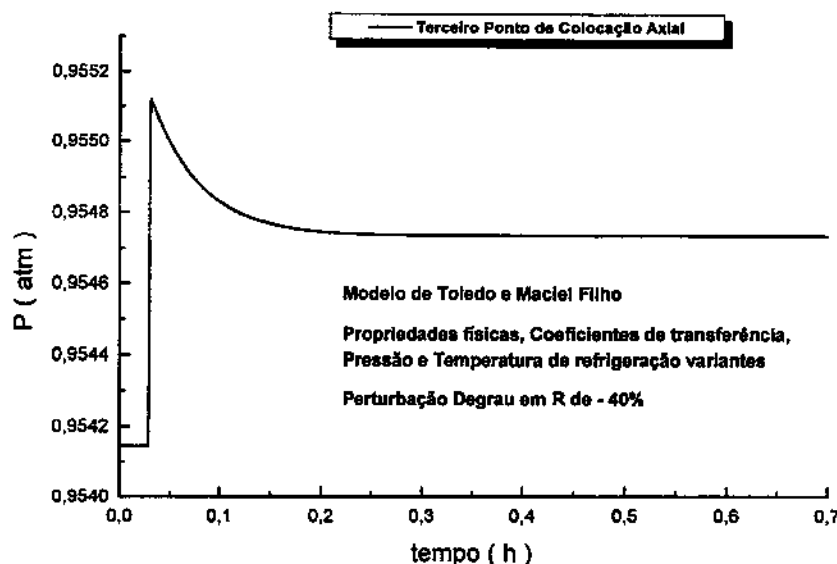


Figura IV.59 – Perfil Dinâmico da Pressão Axial do Reator

A seguir são apresentadas as figuras da temperatura axial do reator, Figuras IV.60 à IV.72, para o modelo de Toledo e Maciel Filho frente a perturbações semelhantes a já apresentadas, só que avaliando o efeito de considerar ou não variações nas propriedades físicas, nos coeficientes de transferência, na temperatura do fluido refrigerante e pressão do reator.

Observa-se que o comportamento do reator pode em certas situações mudar só quantitativamente, mas em outras mudar significativamente. Isto mostra que a consideração da variação dos termos citados anteriormente é importante na análise do comportamento dinâmico do reator, com impacto considerável na definição da estratégia do controle do reator.

A Figura IV.60 mostra simultaneamente os perfis radiais e axial (radial média) no segundo ponto de colocação axial, e portanto, possibilita visualizar e entender que os perfis axiais apresentados nas figuras anteriores e as posteriores são uma média radial num determinado ponto de colocação axial do reator.

Na Figura IV.71 apresenta-se o comportamento dinâmico do reator frente à perturbação degrau em  $T_{fo}$  linearizando a taxa de reação, não linearizando a taxa e linearizando a taxa com atualização do ponto de linearização. Pode-se observar que o comportamento do reator é semelhante nas três situações. Entretanto, nem sempre a linearização da taxa apresenta

bons resultados e a linearização com atualização embora coincidindo com a taxa da reação não linearizada exige um tempo computacional proibitivo para aplicações em tempo real.

Já na Figura IV.72 avalia-se além da variação ou não das propriedades físicas, dos coeficientes de transferência, da temperatura do fluido refrigerante e da pressão do reator, a variação destes termos a cada intervalo de amostragem dos dados. Observa-se a coincidência da variação contínua e alternada dos termos citados e a diferença quantitativa dos dois em relação a condição sem variação.

Com relação ao comportamento dinâmico do modelo baseado em Jutan et al., este pode ser observado pelas Figuras de IV.73 à IV.77. O comportamento deste modelo difere do modelo de Toledo e Maciel Filho, mas reproduz os mesmos fenômenos observados pelo último. Portanto, a escolha de um determinado modelo deve ser feita com base em estudos extensivos avaliando-se o potencial descritivo de cada modelo e se disponível, informações experimentais, para discriminar qual modelo representa melhor o comportamento do reator.

Na Figura IV.78 apresenta-se o comportamento dinâmico do modelo pseudo-homogêneo clássico frente à perturbação degrau em  $T_{fo}$ . Pela figura observa-se que este modelo não consegue reproduzir da mesma forma que os demais modelos o fenômeno da resposta inversa. Portanto, esta figura mostra a importância de considerar na formulação do modelo a presença da capacidade térmica do sólido,  $(\rho C_p)_s$ , conforme os modelos de Toledo e Maciel Filho e Jutan et al..

Além disso, observa-se um comportamento semelhante da solução por colocação ortogonal dupla e pelo método da colocação ortogonal dupla em elementos finitos, Figuras IV.79 e IV.80.

Com relação ao comportamento dinâmico do reator utilizando a taxa de reação de Moura (1984), consultar o Apêndice II. Utilizando esta taxa de reação há necessidade de se utilizar colocação em elementos finitos com o integrador DASSL. Caso isso não seja feito, poderão ocorrer oscilações nas respostas do reator, inclusive com valores negativos. A utilização do integrador DASSL permite a restrição de não permitir valores negativos para as variáveis dependentes.

Esta situação demonstra a necessidade de se avaliar a adequação do método numérico com respeito ao modelo e a taxa de reação, sendo imprescindível estudos de mínima realização, isto é, geração de malhas de discretização com o mínimo de pontos de colocação e que reproduzam adequadamente o comportamento do reator.

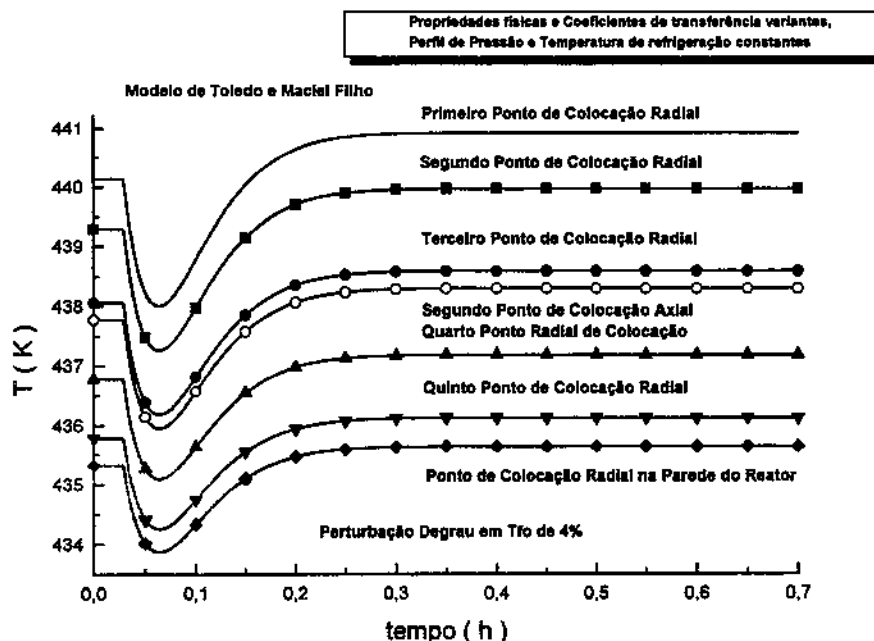


Figura IV.60 - Perfil Dinâmico da Temperatura do Reator

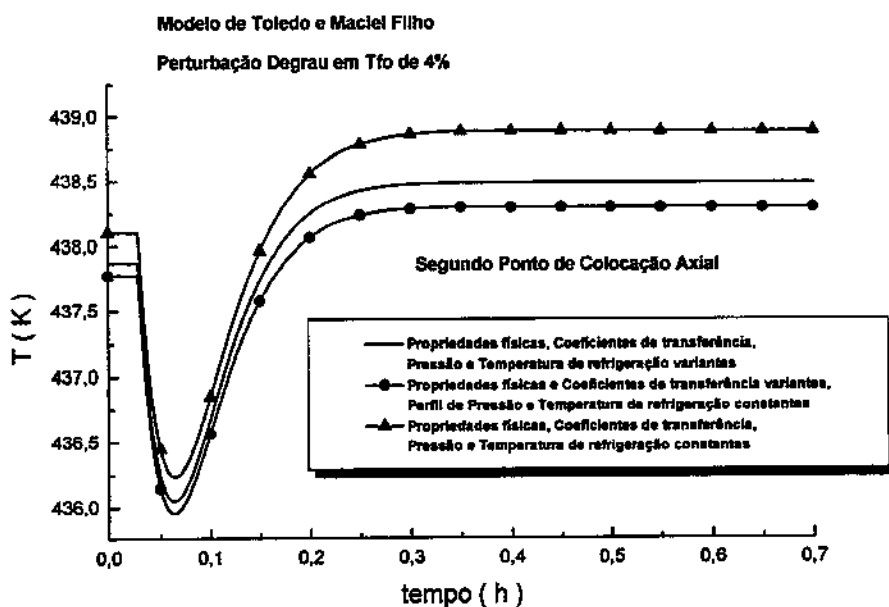


Figura IV.61 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator



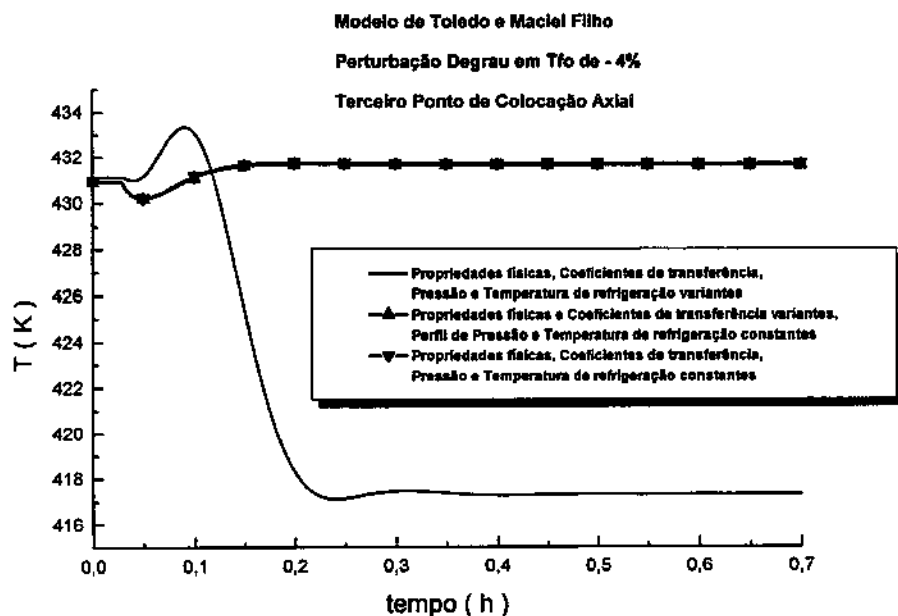


Figura IV.62 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

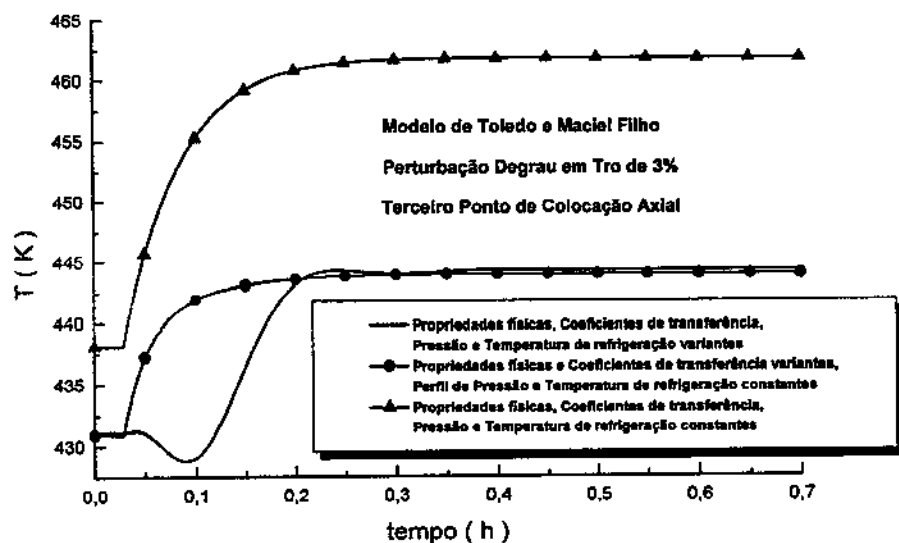


Figura IV.63 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

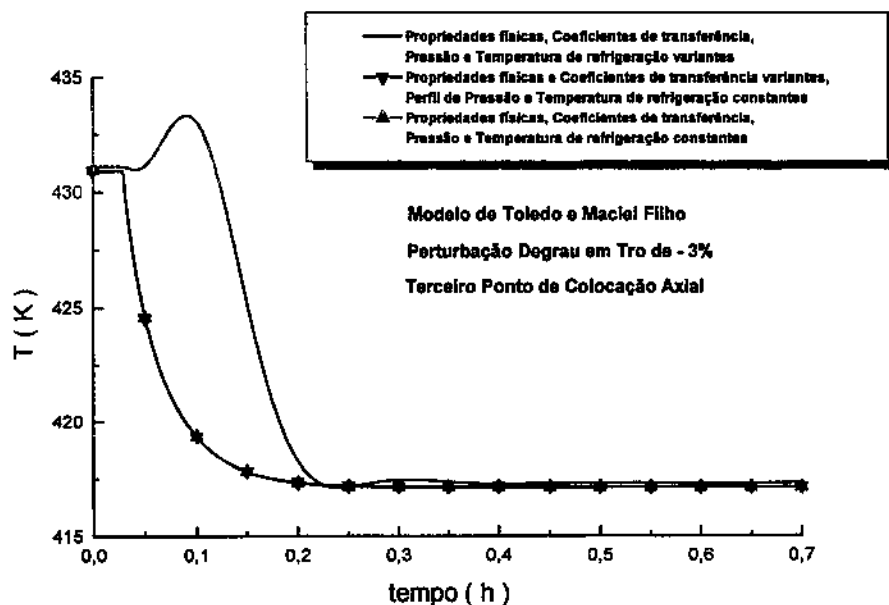


Figura IV.64 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

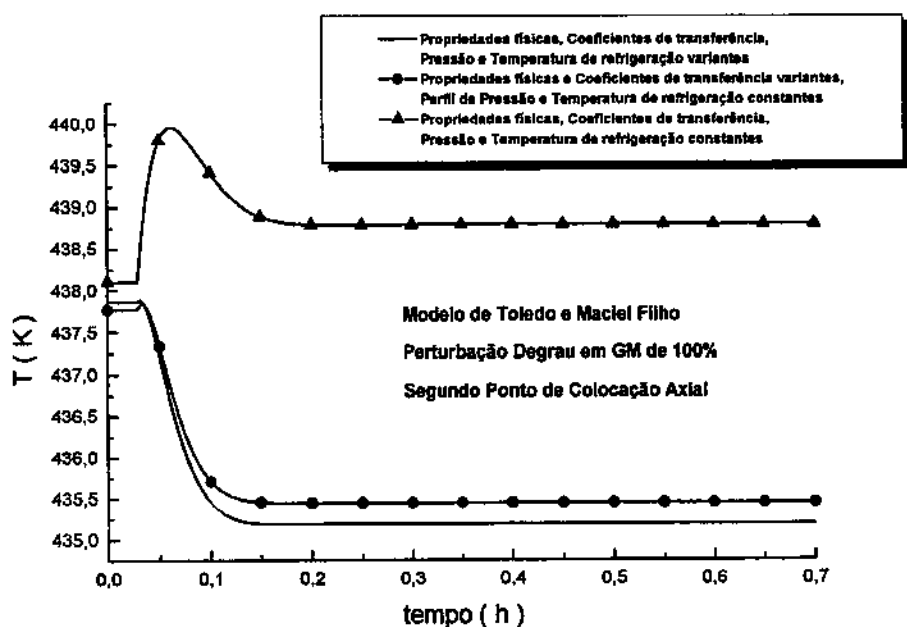


Figura IV.65 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

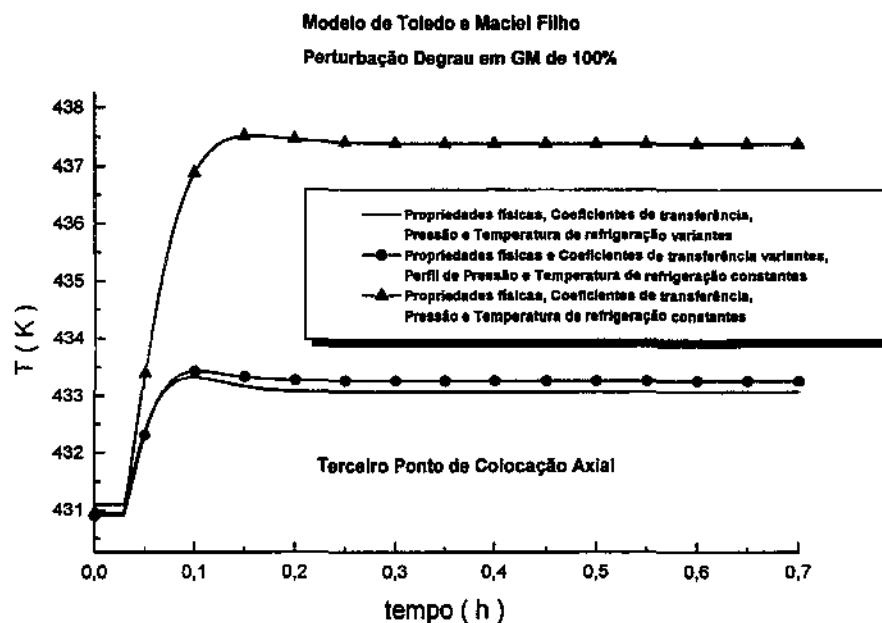


Figura IV.66 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

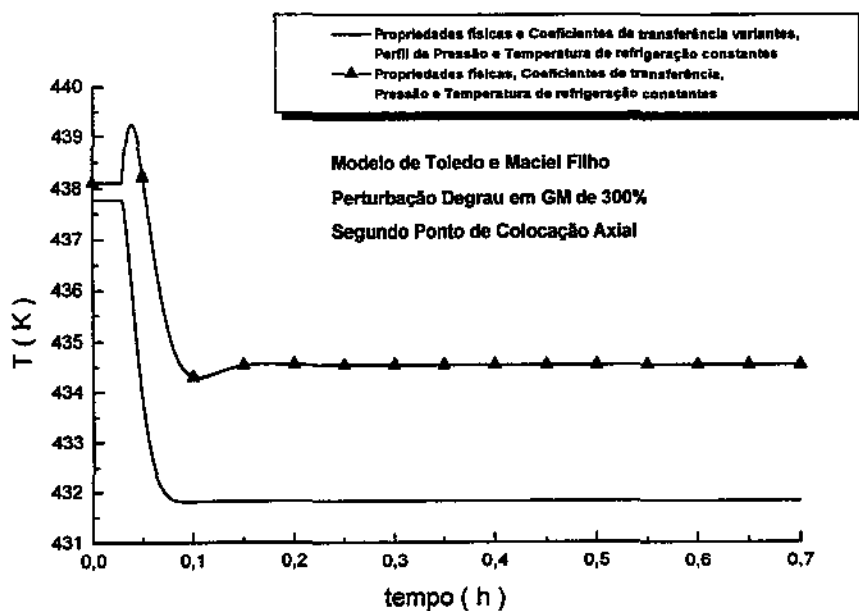


Figura IV.67 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

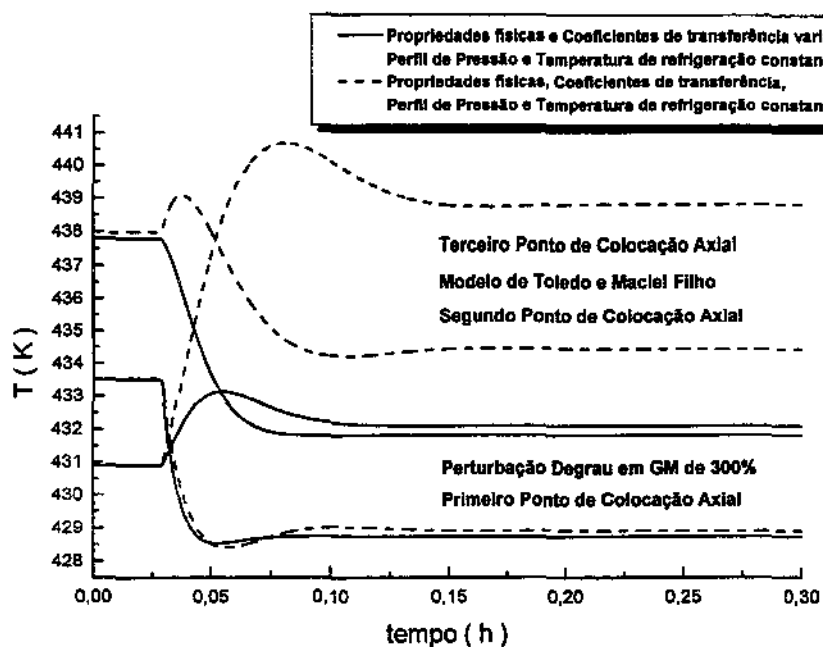


Figura IV.68 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

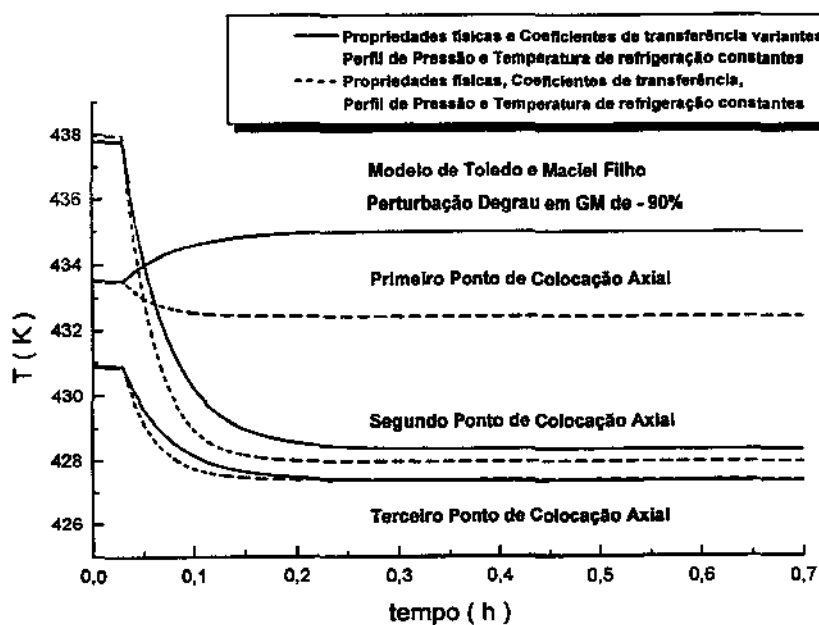


Figura IV.69 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

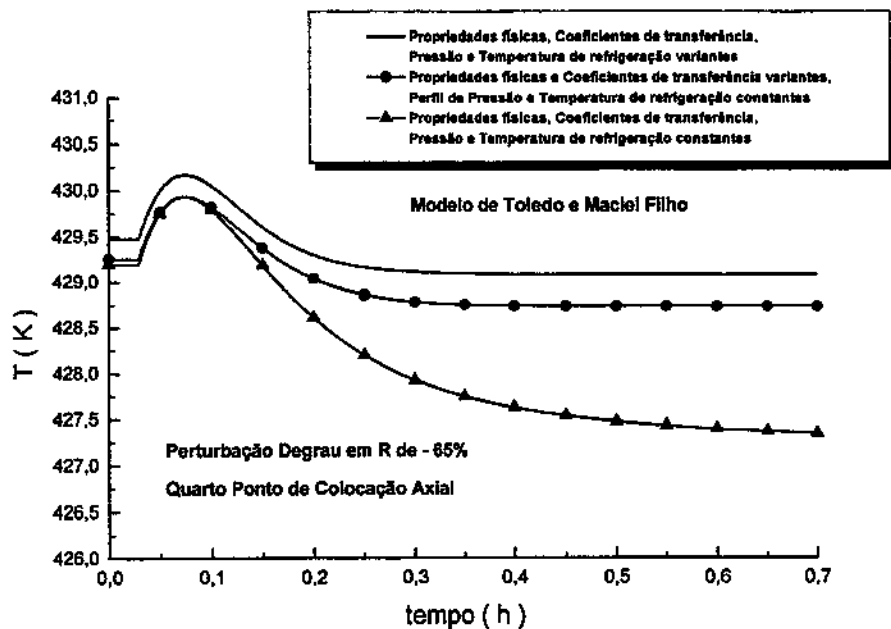


Figura IV.70 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

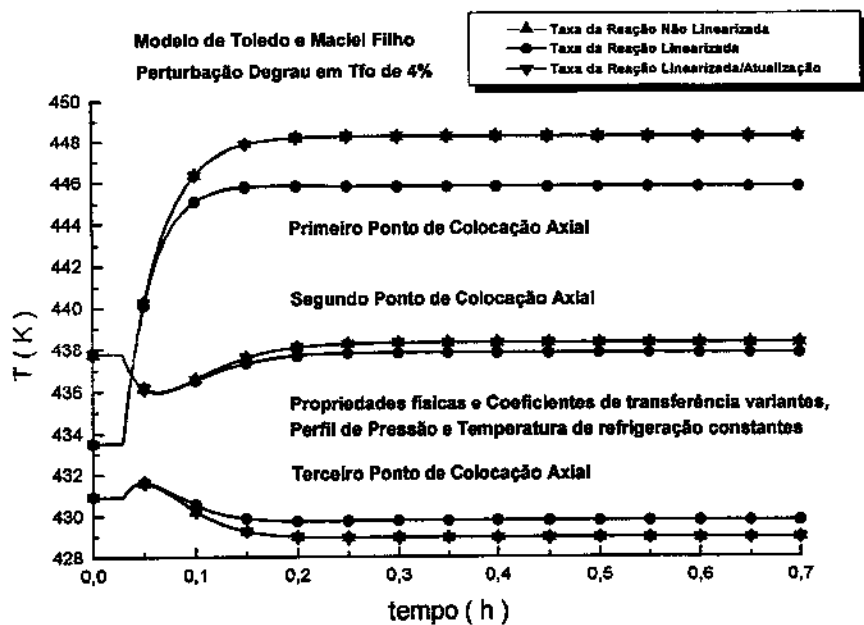


Figura IV.71 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

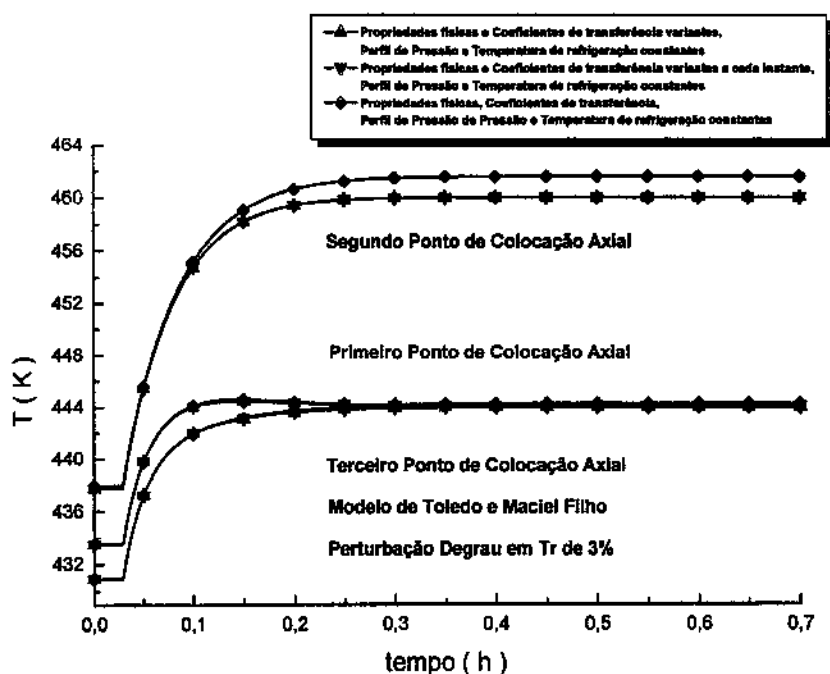


Figura IV.72 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

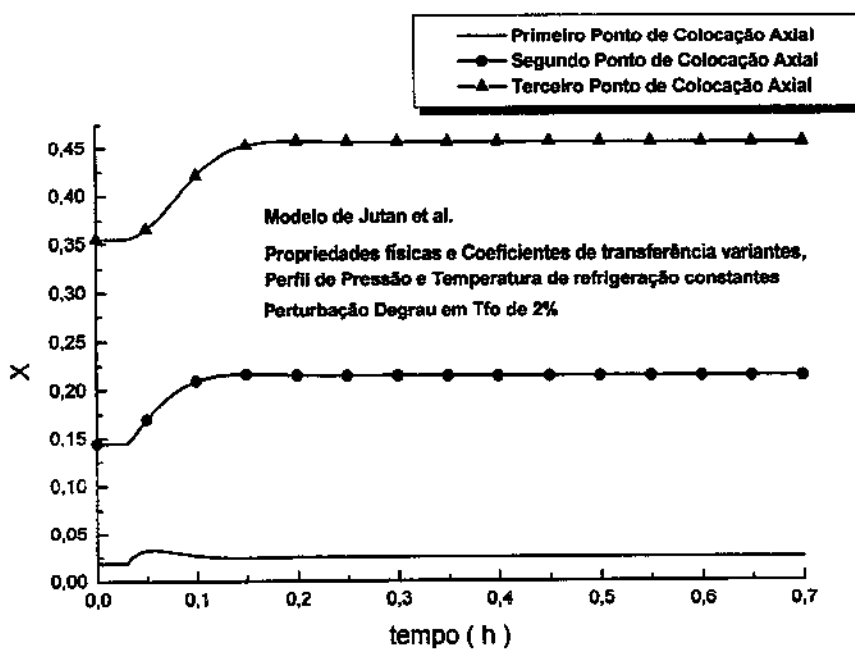


Figura IV.73 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

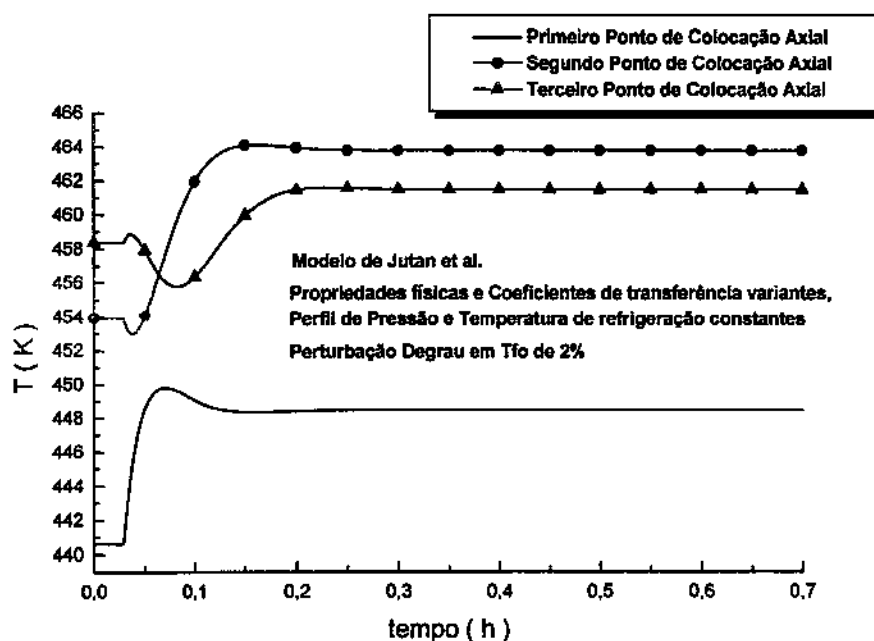


Figura IV.74 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

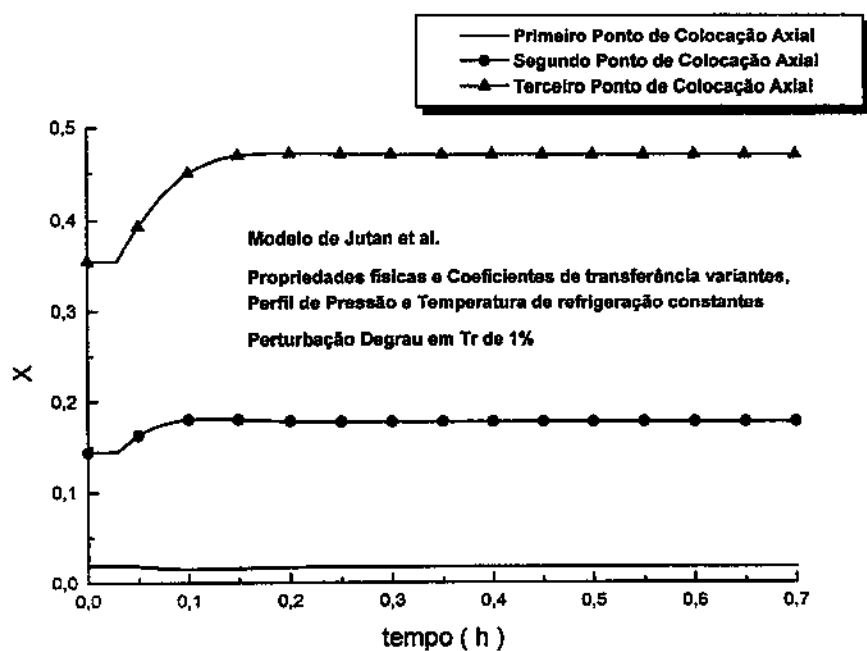


Figura IV.75 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

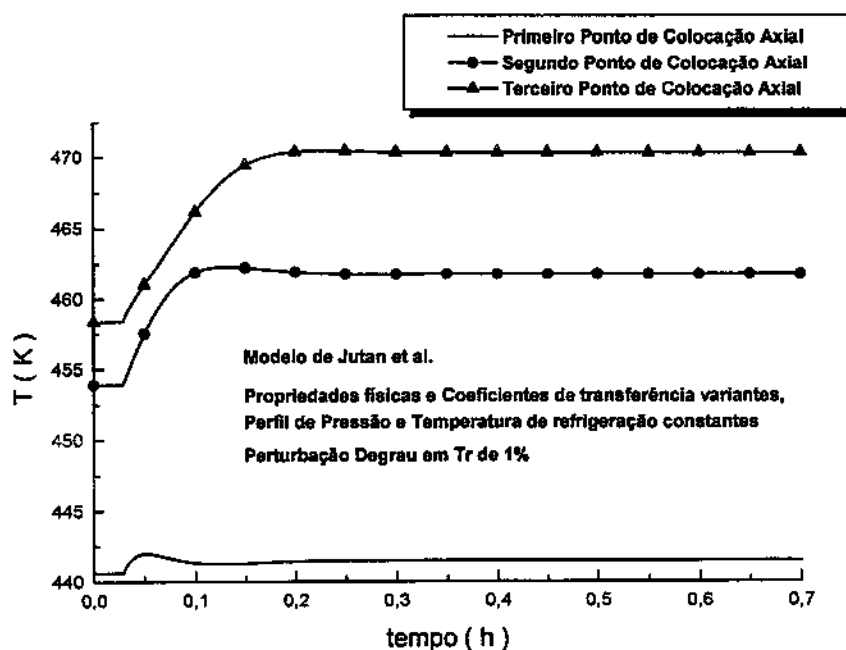


Figura IV.76 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

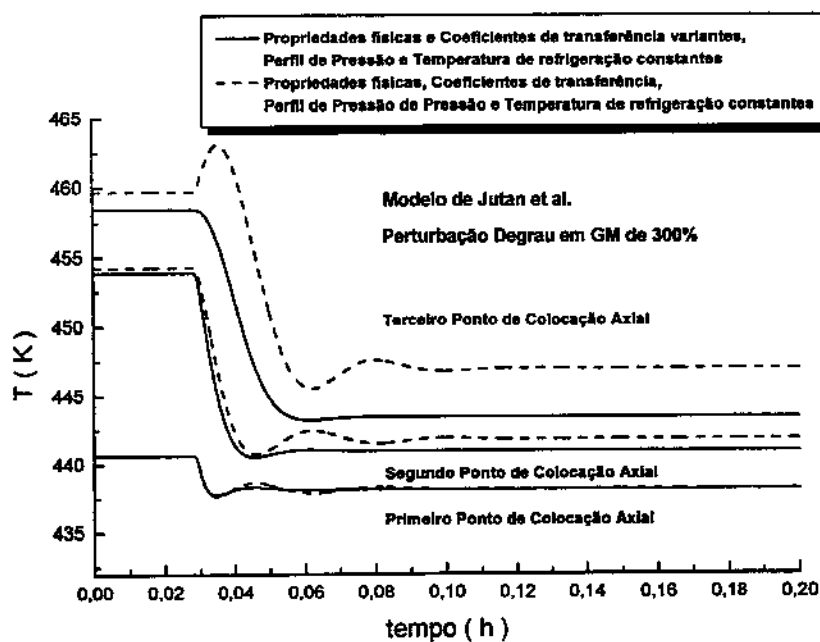


Figura IV.77 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator



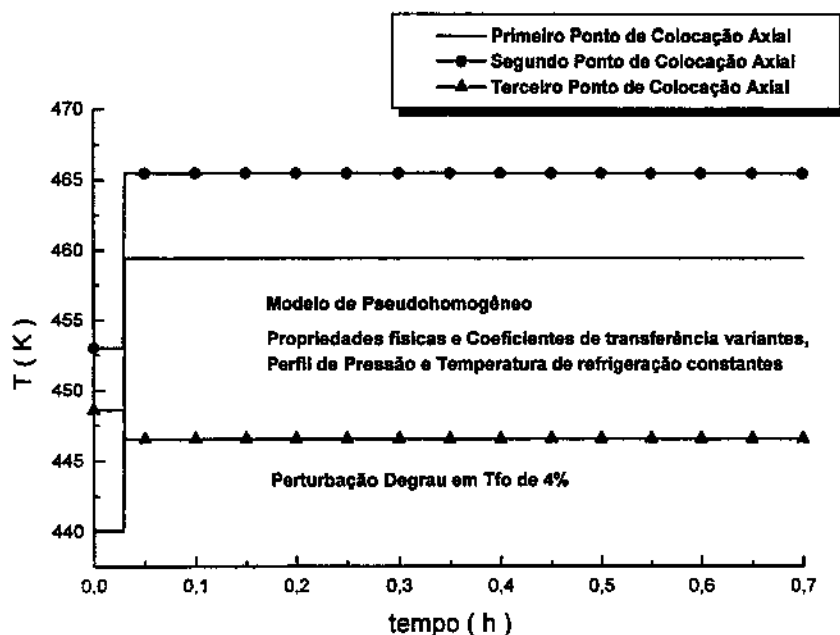


Figura IV.78 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

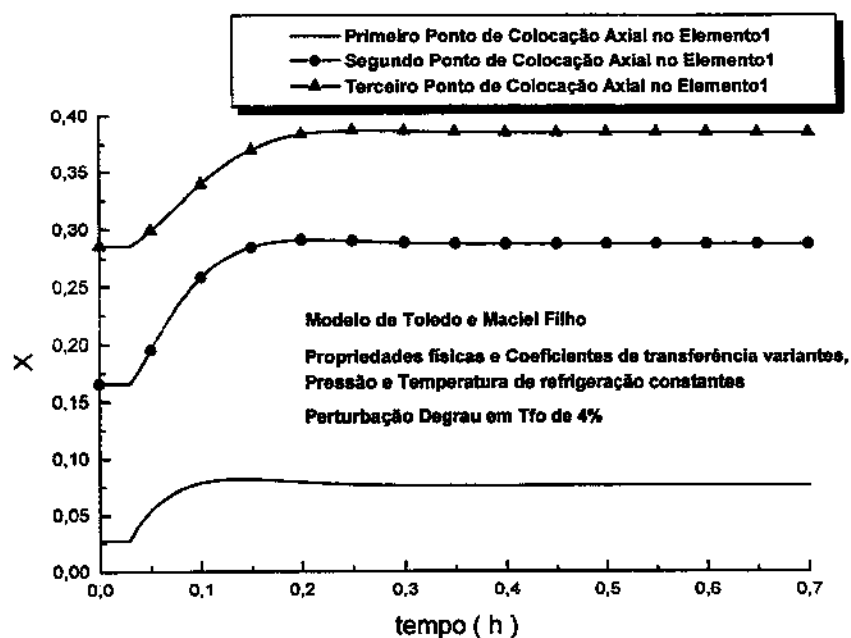


Figura IV.79 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

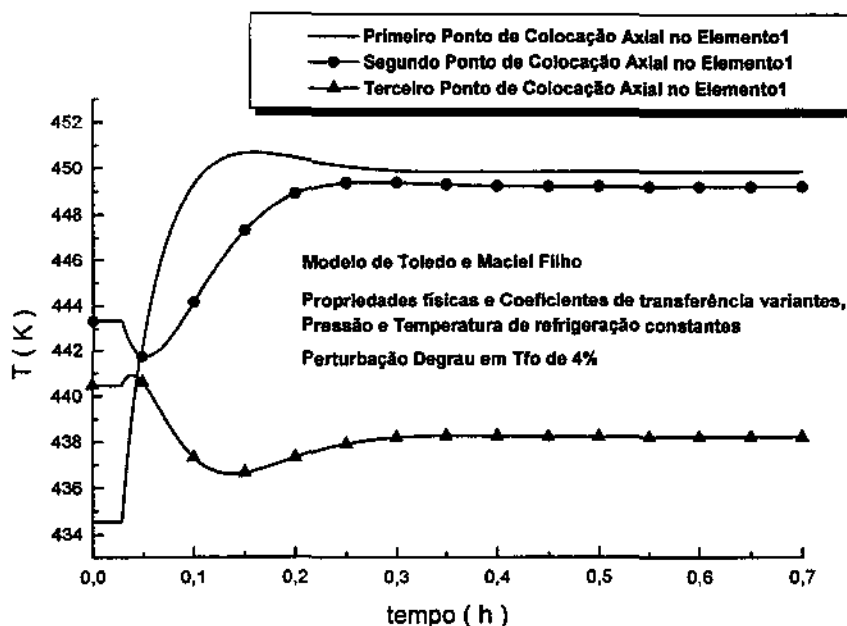


Figura IV.80 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

A seguir são apresentadas as figuras de superfície do comportamento dinâmico da temperatura axial do reator, Figuras IV.81 à IV.88, frente a algumas das perturbações degrau já apresentadas anteriormente.

Neste tipo de representação é mais fácil compreender o comportamento dinâmico geral do reator, inclusive o fenômeno da resposta inversa, as diferenças dos modelos estudados, a maior sensibilidade na parte inicial do reator, e outras particularidades.

Os comentários destas figuras são semelhantes ao já citados anteriormente. Esta representação apenas facilita a compreensão das figuras em duas dimensões apresentados. No entanto, com relação aos detalhes do comportamento numa determinada posição axial do reator, as figuras em duas dimensões possibilitam maior precisão.

Modelo de Toledo e Maciel Filho

Perturbação Degrau em  $T_{fo}$  de 4%

Propriedades físicas e Coeficientes de transferência variantes,

Perfil de Pressão e Temperatura de refrigeração constantes

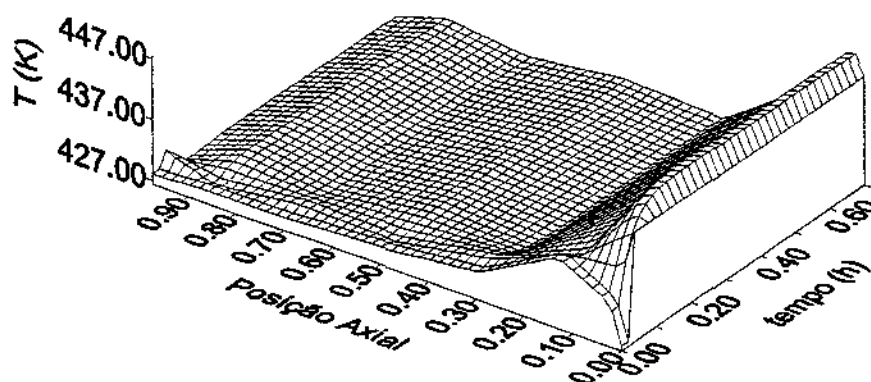


Figura IV.81 - Comportamento Dinâmico da Temperatura Axial no Reator

Modelo de Toledo e Maciel Filho

Perturbação Degrau em  $T_{fo}$  de 4%

Propriedades físicas, Coeficientes de transferência,

Perfil de Pressão e Temperatura de refrigeração constantes

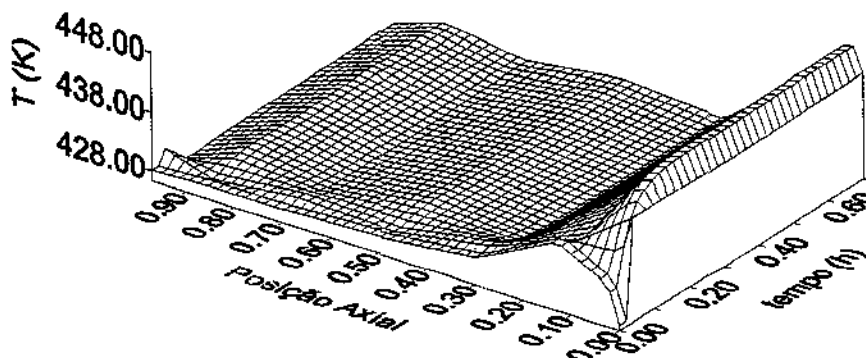


Figura IV.82 - Comportamento Dinâmico da Temperatura Axial no Reator

Modelo de Toledo e Maciel Filho

Perturbação Degrau em  $T_{fo}$  de - 4%

Propriedades físicas e Coeficientes de transferência variantes,

Perfil de Pressão e Temperatura de refrigeração constantes

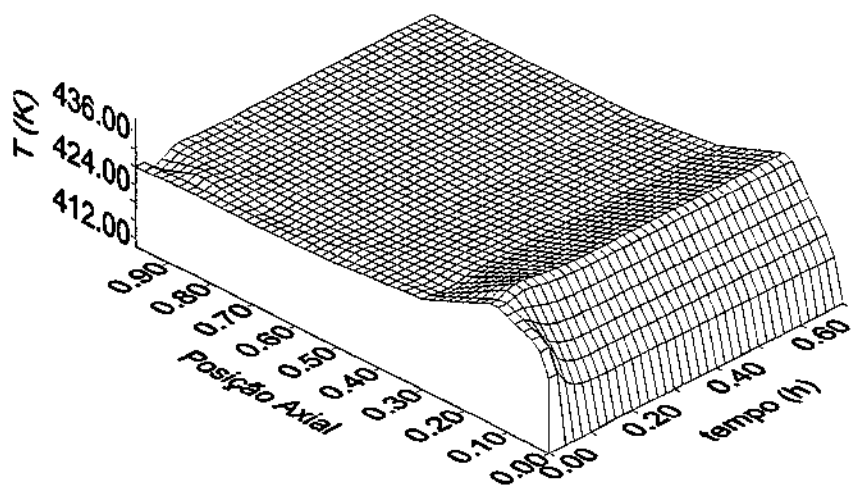


Figura IV.83 - Comportamento Dinâmico da Temperatura Axial no Reator

Modelo de Toledo e Maciel Filho

Perturbação Degrau em  $T_{fo}$  de - 4%

Propriedades físicas, Coeficientes de transferência,

Perfil de Pressão e Temperatura de refrigeração constantes

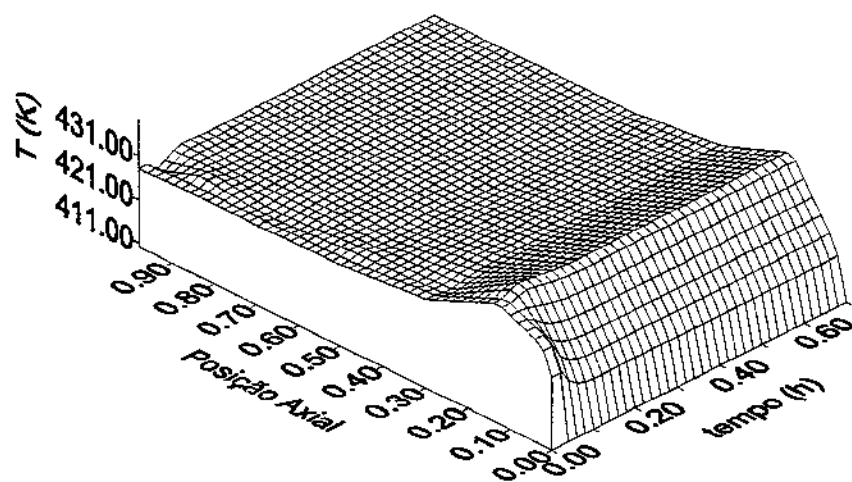


Figura IV.84 - Comportamento Dinâmico da Temperatura Axial no Reator

Modelo de Toledo e Maciel Filho

Perturbação Degrau em  $T_r$  de 3%

Propriedades físicas e Coeficientes de transferência variantes,

Perfil de Pressão e Temperatura de refrigeração constantes

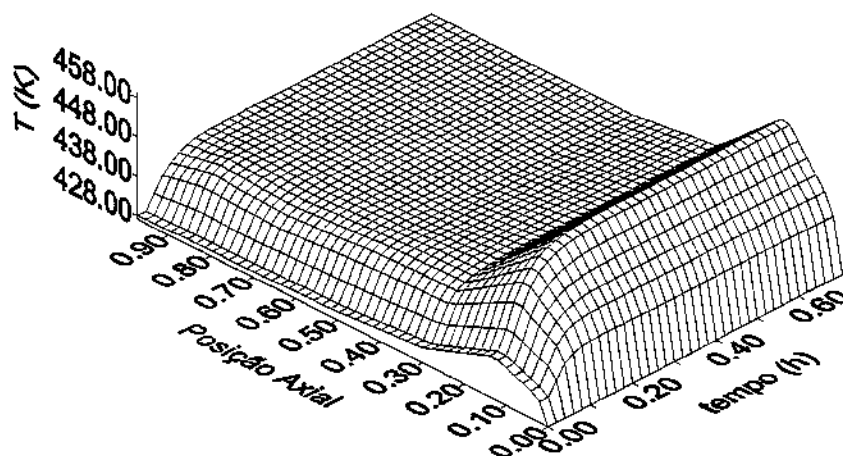


Figura IV.85 - Comportamento Dinâmico da Temperatura Axial no Reator

Modelo de Toledo e Maciel Filho

Perturbação Degrau em  $T_r$  de 3%

Propriedades físicas, Coeficientes de transferência,

Perfil de Pressão e Temperatura de refrigeração constantes

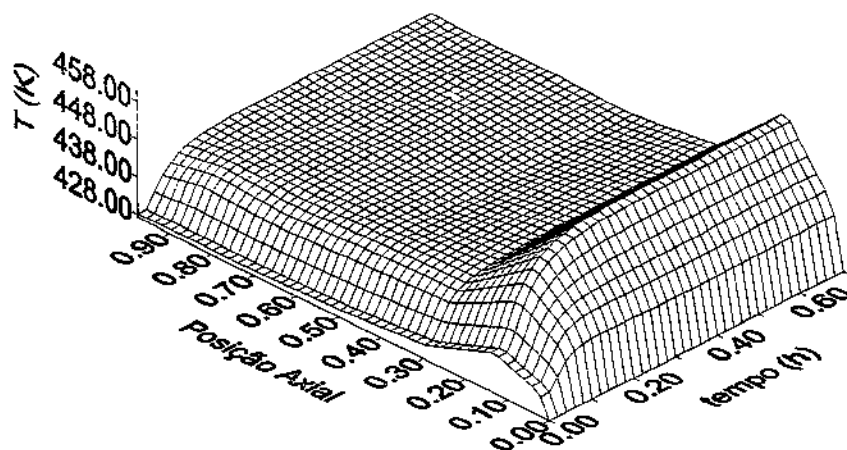


Figura IV.86 - Comportamento Dinâmico da Temperatura Axial no Reator

Modelo de Jutan et al.

Perturbação Degrau em  $T_{fo}$  de 3%

Propriedades físicas e Coeficientes de transferência variantes,

Perfil de Pressão e Temperatura de refrigeração constantes

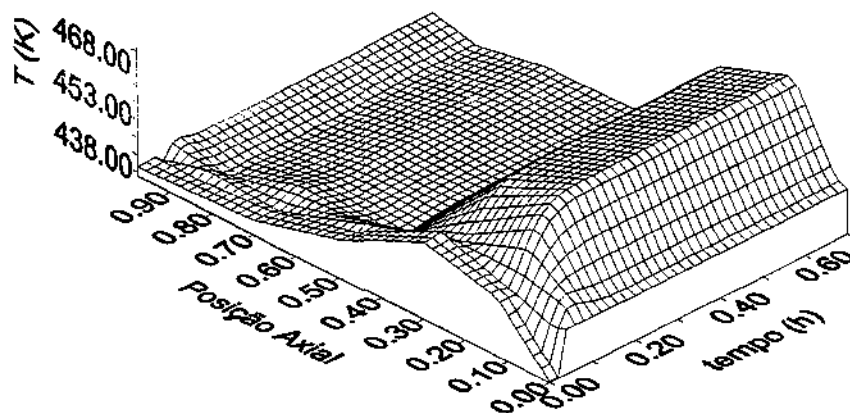


Figura IV.87 - Comportamento Dinâmico da Temperatura Axial no Reator

Modelo de Jutan et al.

Perturbação Degrau em  $T_r$  de 1%

Propriedades físicas e Coeficientes de transferência variantes,

Perfil de Pressão e Temperatura de refrigeração constantes

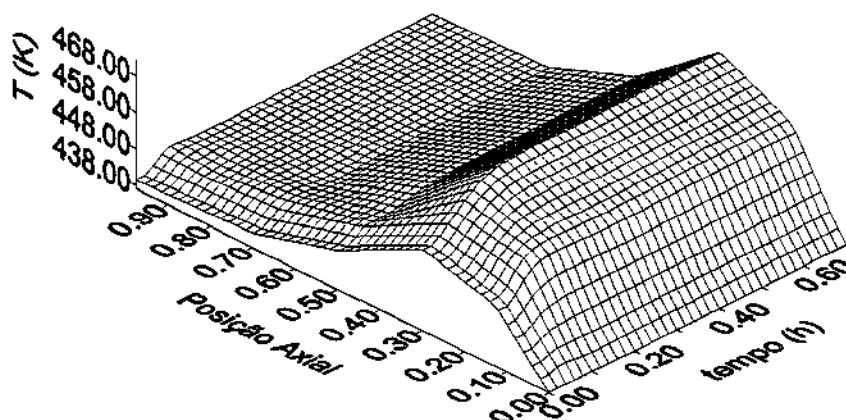


Figura IV.88 - Comportamento Dinâmico da Temperatura Axial no Reator

### IV.3.2 - Modelo Unidimensional

Com o objetivo de reduzir o tempo computacional exigido para a solução dos modelos bidimensionais para fins de controle desenvolveu-se os modelos unidimensionais.

Estes modelos foram desenvolvidos através da aplicação das técnicas de redução de modelo descritas no Capítulo III. Alguns dos modelos desenvolvidos possibilitaram uma boa concordância com os modelos bidimensionais, além de reduzir o tempo computacional requerido para a solução do modelo matemático.

No entanto, deve-se ressaltar que os modelos reduzidos gerados pelas técnicas de redução que eliminam a variável radial ficaram menos sensíveis às perturbações do que os modelos bidimensionais, provavelmente devido a eliminação dos gradientes radiais, os quais mostram influenciar no comportamento dinâmico do reator. Outro fator também responsável pela menor sensibilidade dos modelos unidimensionais foi a aproximação matemática gerada para o termo de reação resultante da aplicação das técnicas de redução.

A seguir apresenta-se o comportamento dinâmico destes modelos, Figuras IV.89 à IV.105, os quais se assemelham qualitativamente muito com os já apresentados anteriormente.

Com relação as simulações realizadas, estas foram feitas à pressão do reator e temperatura do fluido refrigerante constantes, e sobre os comentários, pode-se dizer que de maneira qualitativa alguns destes modelos representam os modelos bidimensionais descritos anteriormente, ficando a desejar somente de maneira quantitativa. Portanto, os mesmos comentários de uma maneira geral tecidos anteriormente servem neste tópico. Também deve-se ressaltar que nas figuras que apresentarem duas intensidades diferentes de perturbação em um mesmo parâmetro, a de maior magnitude se refere aos modelos unidimensionais.

Detalhes sobre os valores dos parâmetros de operação e projeto utilizados tanto para modelos unidimensionais como bidimensionais são apresentados no Apêndice III.

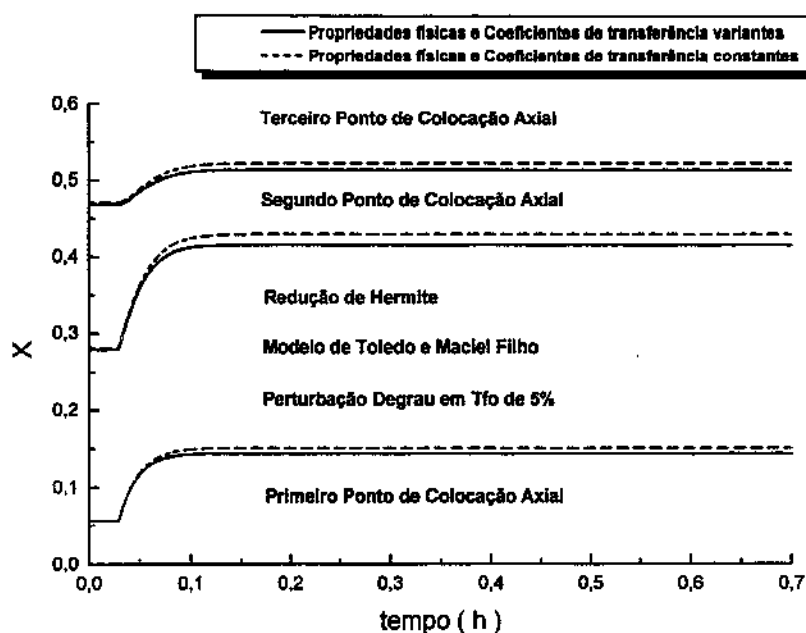


Figura IV.89 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

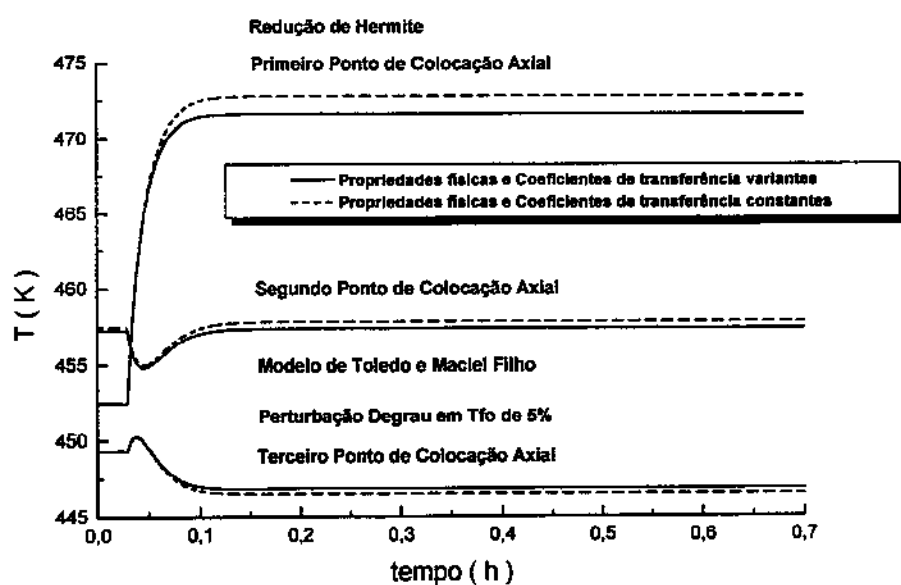


Figura IV.90 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator



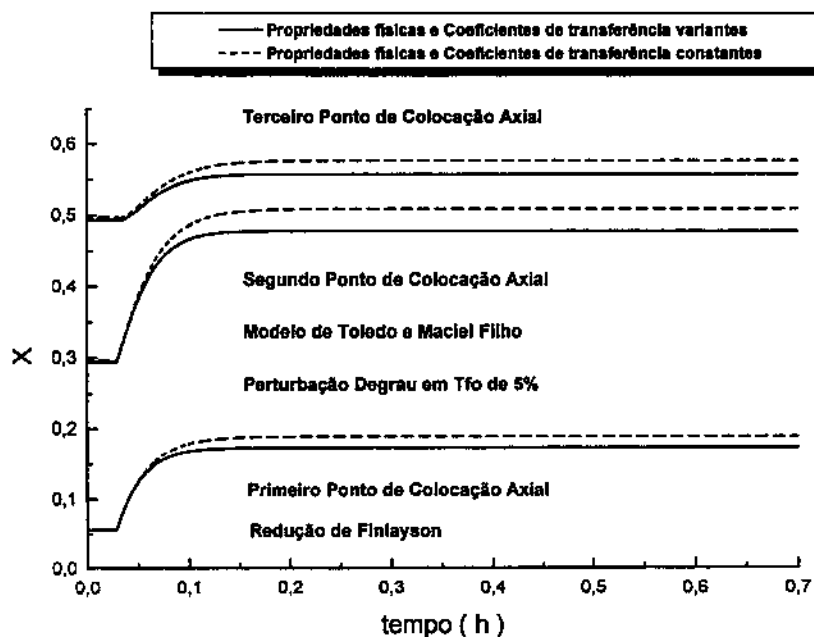


Figura IV.91 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

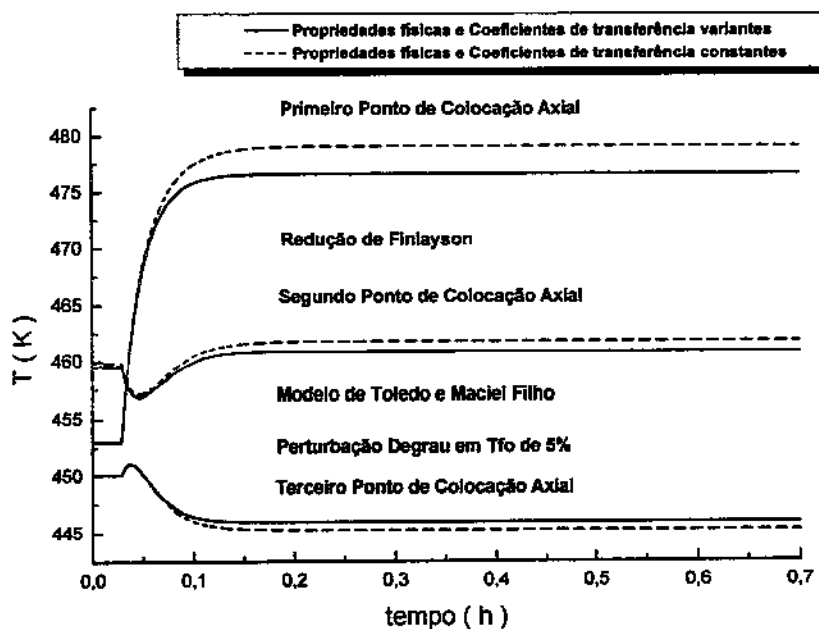


Figura IV.92 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

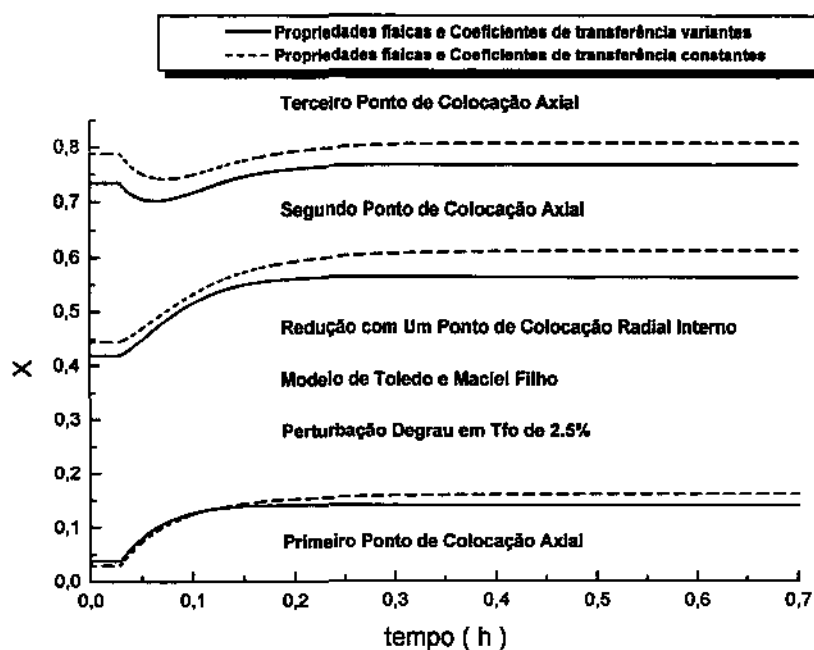


Figura IV.93 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

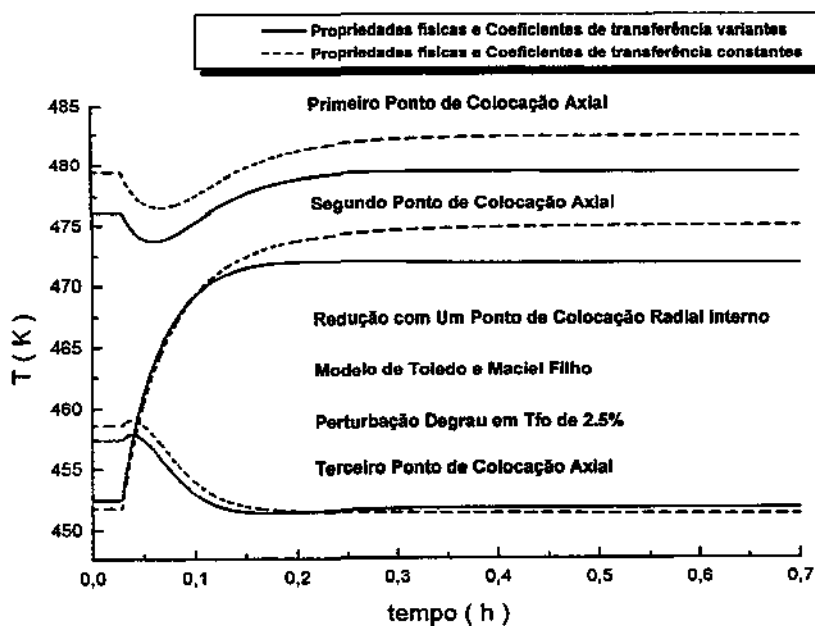


Figura IV.94 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

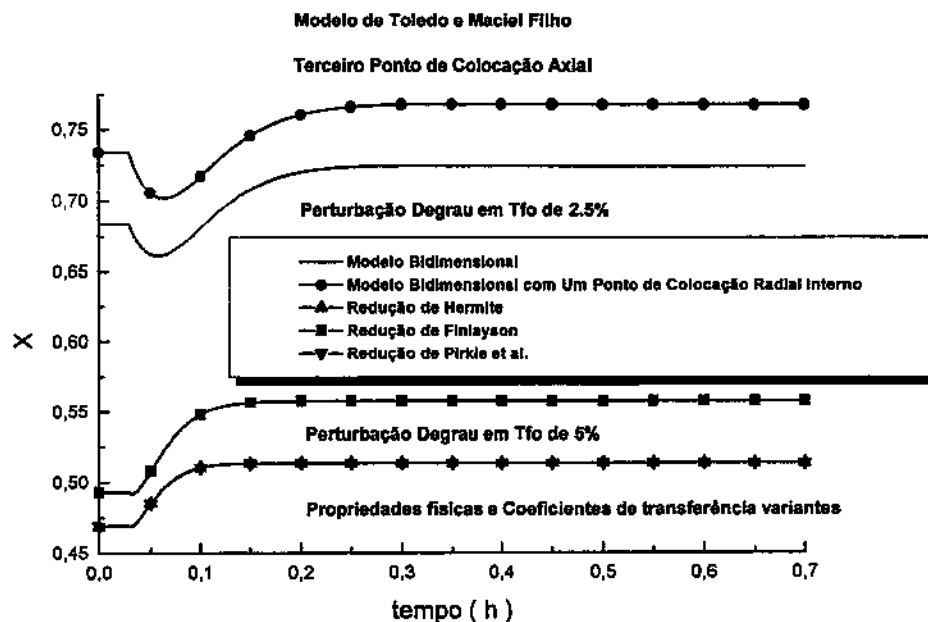


Figura IV.95 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

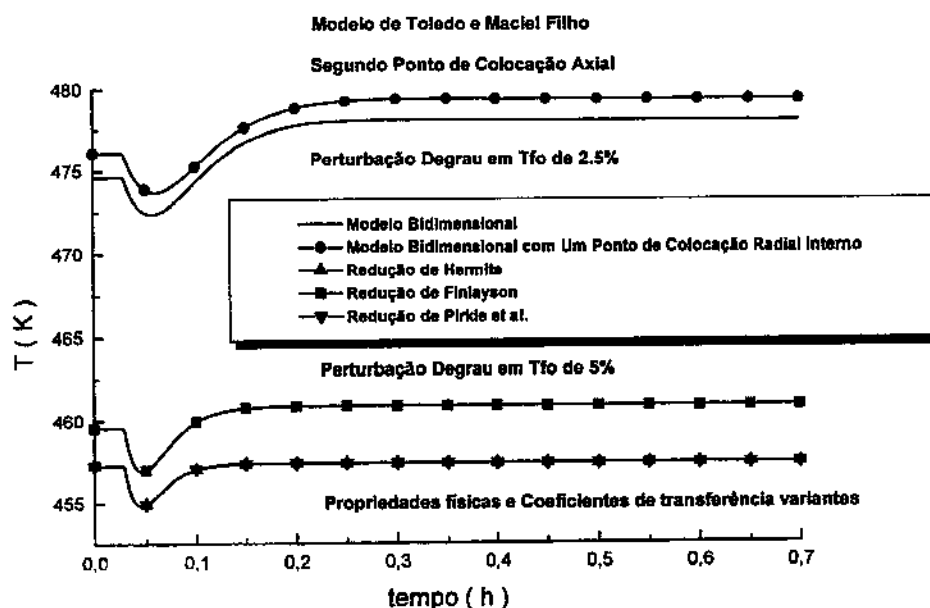


Figura IV.96 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

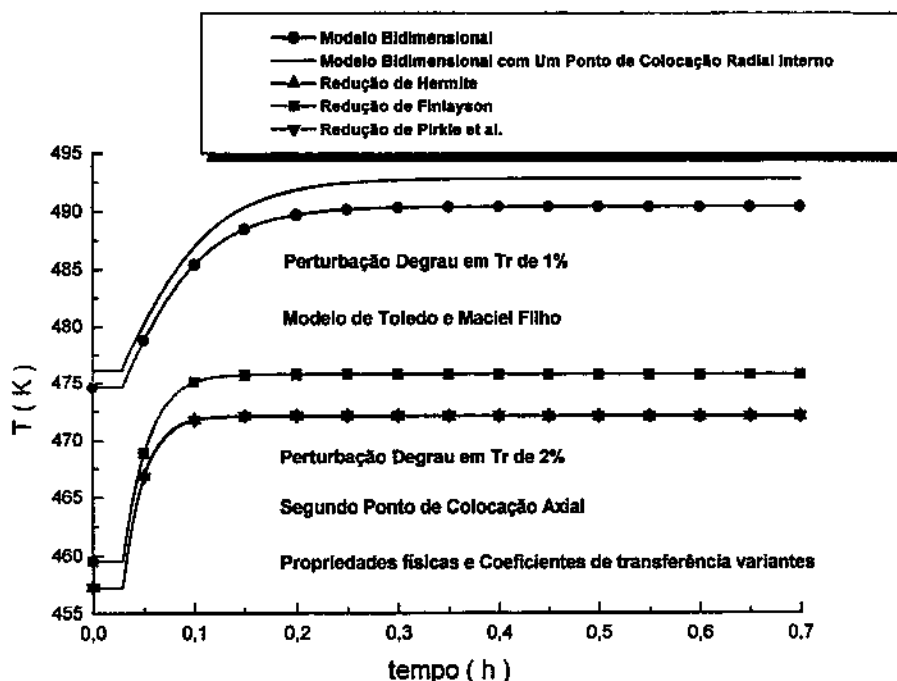


Figura IV.97 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

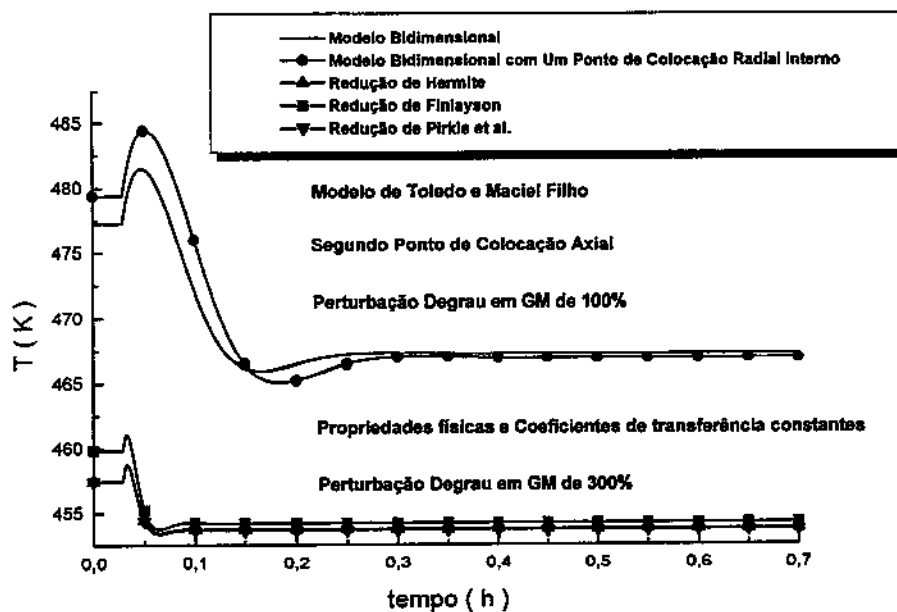


Figura IV.98 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

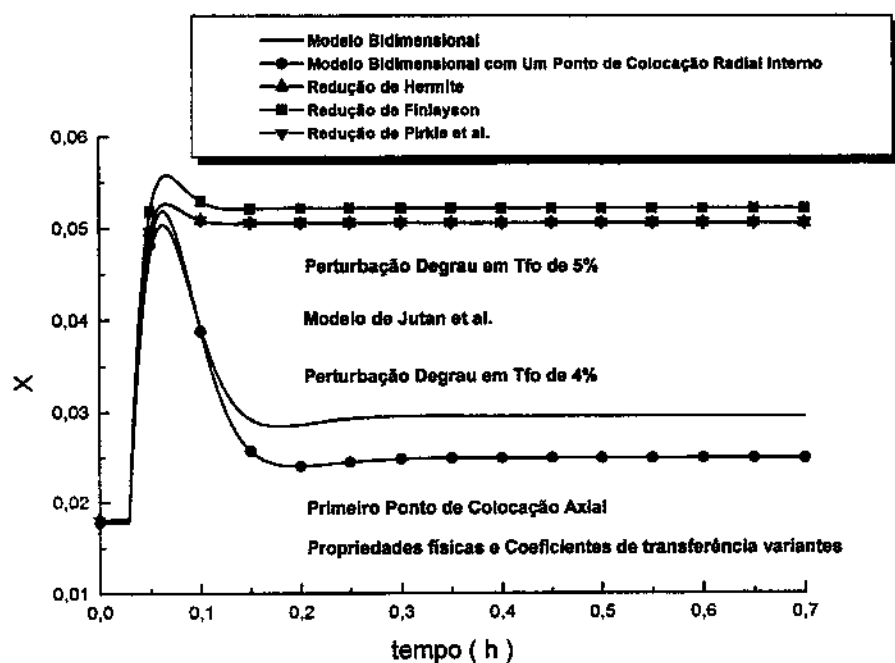


Figura IV.99 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

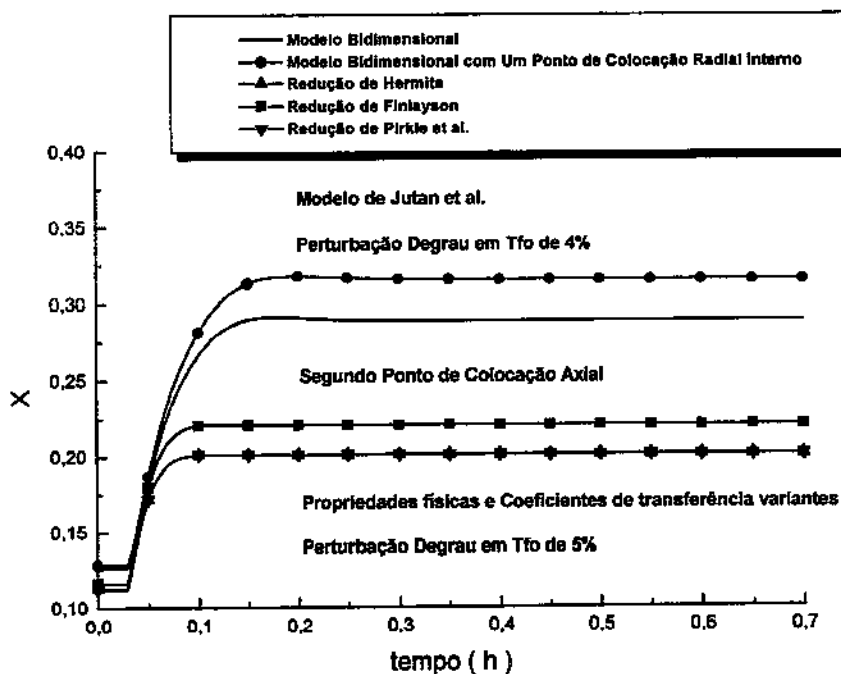


Figura IV.100 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

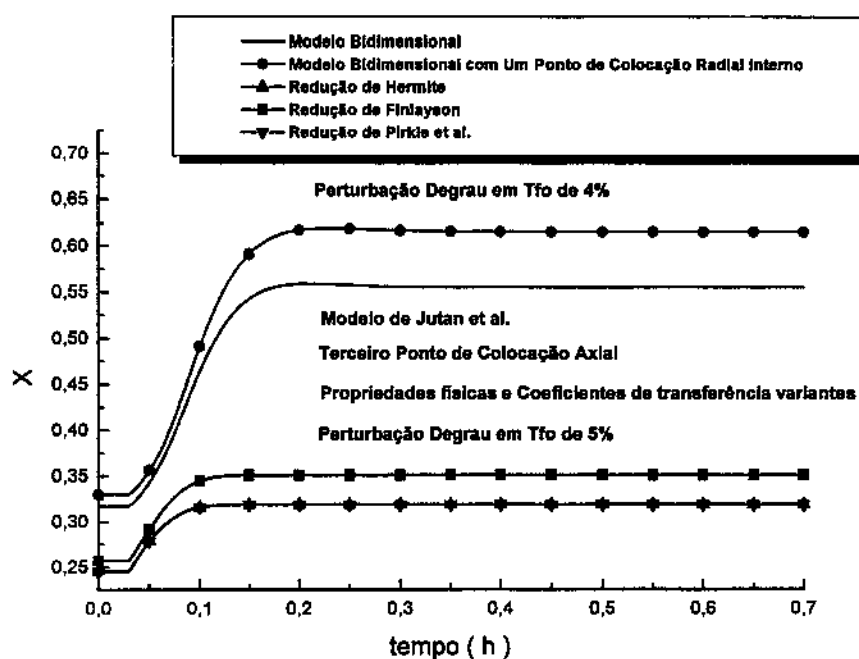


Figura IV.101 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

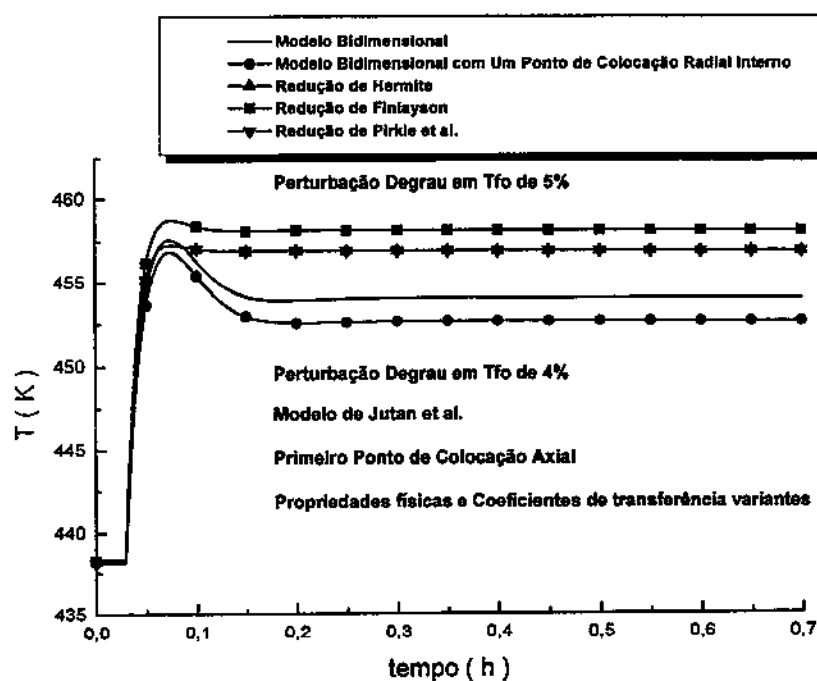


Figura IV.102 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

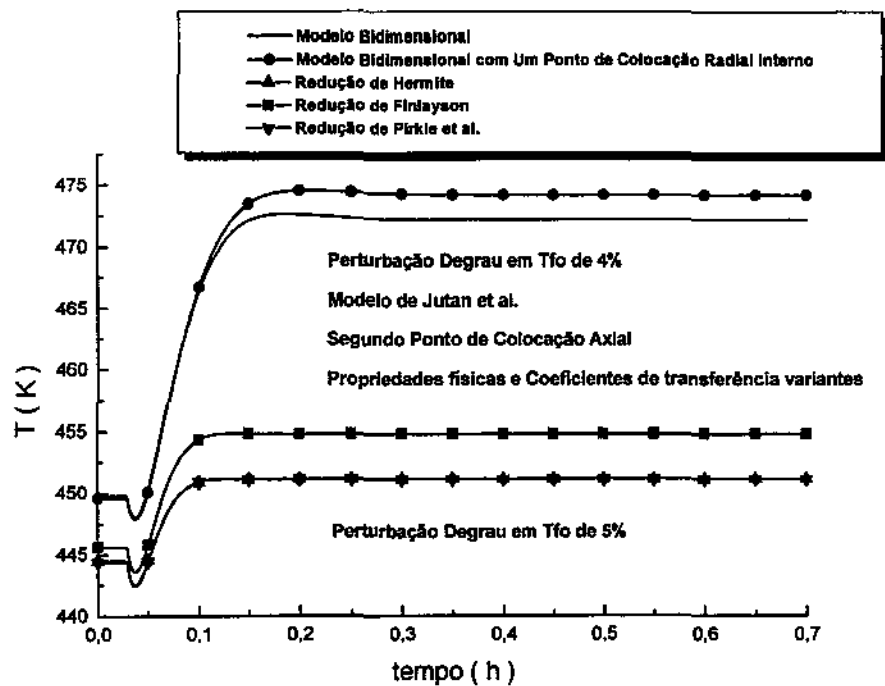


Figura IV.103 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

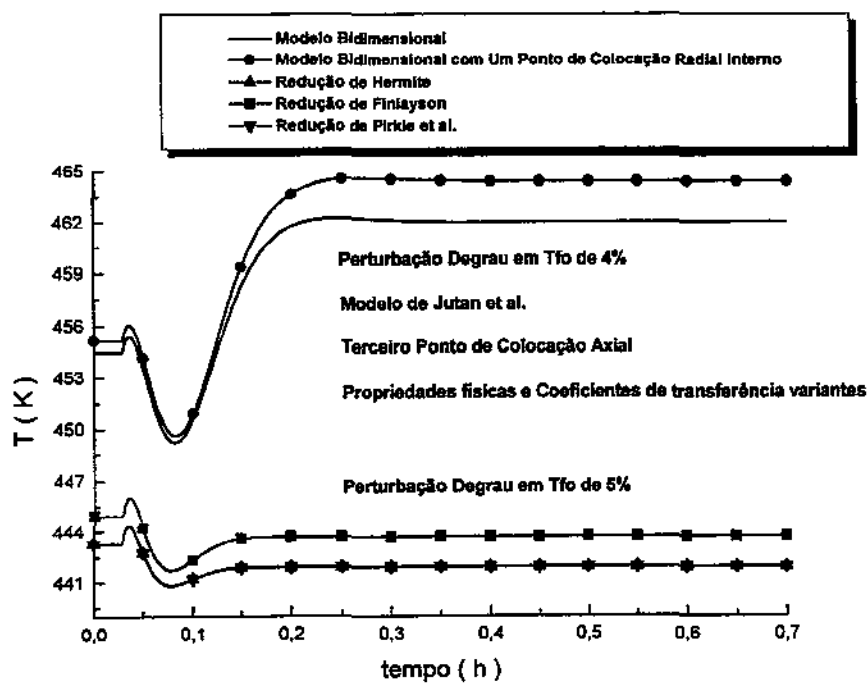


Figura IV.104 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

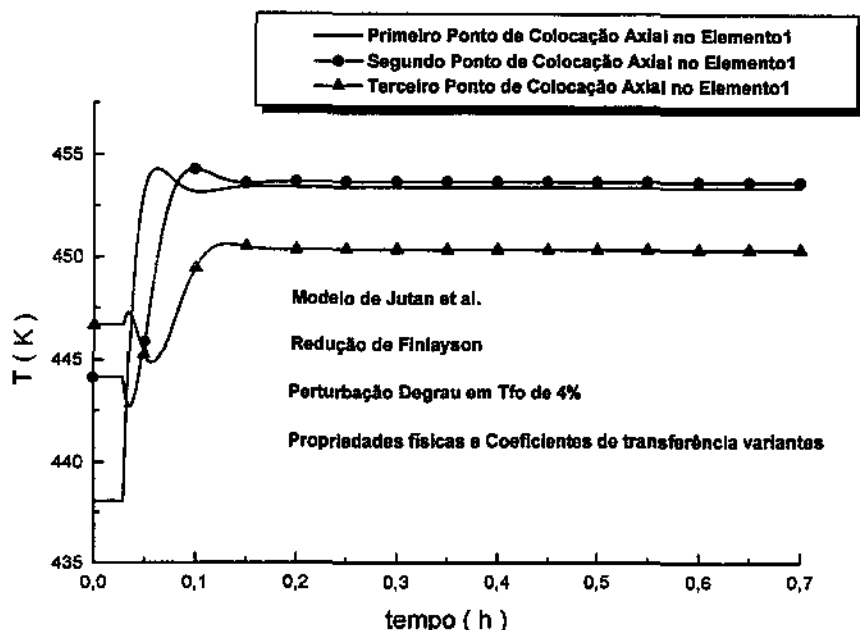


Figura IV.105 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

#### IV.4 – Conclusões

Neste capítulo apresentou-se o comportamento dinâmico do reator utilizando diversos modelos, bi e unidimensionais, frente a diversas perturbações degrau. Dos resultados obtidos conclui-se que os modelos mostraram-se capazes de reproduzir qualitativamente as principais características do comportamento dinâmico dos reatores catalíticos de leito fixo encontradas na literatura e na prática, possibilitando a utilização dos mesmos para estudos de controle e otimização de processos em tempo real. Uma questão fundamental de ser comentada é a importância da utilização da capacidade térmica do sólido,  $(\rho C_p)_s$ , na modelagem do reator (modelo de Toledo e Maciel Filho e Jutan et al.) visando representar adequadamente o comportamento dinâmico do mesmo. Este fato pode ser observado pela péssima reprodução do comportamento dinâmico do reator pelo modelo pseudo-homogêneo clássico, mostrando a necessidade de um modelo que melhor represente o comportamento do reator, no caso os modelos pseudo-homogêneos modificados.

Com relação ao desempenho das técnicas de redução observou-se a superioridade das técnicas utilizando um ponto de colocação ortogonal radial



interno e de Finlayson, mostrando que estas técnicas se constituem numa ferramenta de grande utilidade na redução da dimensão espacial ou da solução de modelos detalhados. Portanto, estas técnicas geram modelos reduzidos que permitem realizar estudos da avaliação do desempenho de algoritmos de controle e de otimização de maneira confiável e rápida. Além do que o tempo computacional exigido para a solução destes modelos pode chegar a ser 5 vezes mais rápido do que o exigido pelos modelos bidimensionais, justificando a sua utilização para o estudo de controle e otimização em tempo real.

Deve-se ressaltar também que as técnicas de Hermite e de Pirkle et al. apresentaram desempenho razoável para as condições de operação estudadas neste trabalho, podendo em outras condições apresentar desempenho superior. Portanto, o comportamento das técnicas de redução observadas foram obtidas para condições de operação específicas do reator e a generalização das conclusões devem ser cautelosas, e sempre que possível fazer as mesmas análises para novas regiões de operação.

Outra questão importante de ser comentada é a menor sensibilidade dos modelos unidimensionais em relação aos bidimensionais. Este fato deve-se provavelmente pela influência da dimensão radial no comportamento dinâmico do reator e pela geração do termo de reação pelas técnicas de redução com aproximações matemáticas que minimizam a sensibilidade dos modelos frente à perturbações degrau nos parâmetros operacionais. Portanto, estes fatores podem ser determinantes no desempenho e utilização destas técnicas na geração de modelos reduzidos confiáveis.

De uma maneira geral as técnicas de redução (com redução de uma dimensão espacial do modelo) geram modelos unidimensionais cuja diferença se encontra no termo de troca térmica entre o meio reacional e o fluido refrigerante. Portanto, estas técnicas geram parâmetros de troca térmica com expressões matemáticas distintas.

Com relação as concordâncias (técnicas de Hermite e de Pirkle et al.) e diferenças entre os comportamentos dinâmicos dos modelos unidimensionais gerados pelas técnicas de redução, como também pela limitação em reproduzir o comportamento dinâmico do reator (técnica de redução clássica); estas devem-se principalmente pelos valores dos parâmetros de troca térmica gerados e pelas condições operacionais e de projeto do reator escolhidos. Para mais detalhes sobre o desempenho destas técnicas de redução consultar Giudici (1990), Dixon (1996), Jorge (1998) e Toledo e Maciel Filho (1998c, 1999b).

Finalizando, os modelos bidimensionais (incluindo o modelo reduzido gerado pela técnica de redução utilizando um ponto de colocação ortogonal radial interno) e o unidimensional gerado pela técnica de Finlayson foram os modelos que melhor representaram o comportamento dinâmico do reator catalítico de leito fixo nas condições de operação estudadas. A preferência por um destes modelos vai depender do tipo de aplicação e dos dados experimentais disponíveis do processo.

Nos Capítulos V e VI a seguir utilizou-se o modelo bidimensional e o modelo reduzido com um ponto de colocação ortogonal radial interno (bidimensional) baseado em Toledo e Maciel Filho. No entanto, modelos bidimensionais e reduzidos baseados em Jutan et al. também poderiam ser utilizados já que os mesmos apresentam comportamento dinâmico qualitativamente semelhantes aos baseados em Toledo e Maciel Filho. A escolha por um modelo em detrimento dos outros poderia ser justificada se houvesse dados experimentais do comportamento dinâmico do reator.

Mais detalhes do comportamento dinâmico do reator de leito fixo, utilizando-se os modelos citados neste capítulo consultar Toledo (1997) e Toledo e Maciel Filho(1994a, 1994b, 1994c, 1995, 1996a, 1996b, 1996c, 1996d, 1997a, 1997b, 1997c, 1997d, 1998a, 1998b, 1998c, 1998d, 1999a, 1999b, 1999c).

No próximo capítulo é apresentado um estudo de sensibilidade paramétrica através da técnica do planejamento fatorial, a qual permite captar os efeitos primários e de interação dos parâmetros operacionais do reator nos perfis de temperatura do mesmo. Informação esta fundamental para a definição e implementação de uma estratégia de controle para o reator catalítico de leito fixo.

## **CAPÍTULO V – ANÁLISE DE SENSIBILIDADE**

### **V.1 – Introdução**

Neste capítulo é apresentado o método do planejamento fatorial, muito utilizado em estudos experimentais, e aplicado neste trabalho tomando-se como gerador de dados um modelo matemático determinístico do reator. Este método possibilita o conhecimento de como certos parâmetros influenciam o sistema com apenas poucos experimentos, Barros Neto et al. (1995).

A intenção neste trabalho foi avaliar o desempenho desta técnica no sentido de captar as influências dos parâmetros de operação, efeitos primários e de interação, no comportamento dinâmico do reator. Este conhecimento é muito importante na elaboração da estratégia de controle.

Outro fator que procurou-se avaliar é a capacidade do método de fornecer o efeito ao longo do tempo, conhecimento este não disponível quando se utiliza, por exemplo, o método do RGA.

Os dados fornecidos pelo método do fatorial foram obtidos utilizando o modelo de Toledo e Maciel Filho. Detalhes sobre os dados dos valores dos parâmetros de operação e projeto do reator consultar o Apêndice III.

### **V.2 – Análise de Sensibilidade das Variáveis do Processo através do Planejamento Fatorial**

Um dos problemas mais comuns em estudos de sistemas é a determinação da influência de uma ou mais variáveis sobre uma outra variável de interesse, em outras palavras, tem-se um certo número de fatores atuando sobre o sistema em estudo, produzindo um certo número de respostas. O sistema é considerado como uma função desconhecida cuja atuação sobre as variáveis de entrada (fatores) produz como saída as variáveis observadas.

Tendo definido os fatores e respostas de interesse para o sistema a ser investigado, deve-se definir claramente o objetivo de estudo, seja ele experimental ou através de simulações do modelo, porque isso determinará que tipo de planejamento deve ser utilizado.

Neste ponto tem-se um tipo particular de planejamento experimental, o planejamento fatorial de dois níveis. Planejamentos deste tipo são de grande utilidade em investigações preliminares, quando se deseja saber se determinados fatores tem ou não influência sobre a resposta, e não se está interessado, ainda, em uma descrição muito rigorosa dessa influência.

O método do planejamento fatorial consiste em selecionar um número fixo de níveis e então executar experimentos com todas as possíveis combinações destes. Geralmente faz-se um planejamento fatorial com dois níveis (nível -1 e nível +1) em relação a um estado padrão (nível 0 ou ponto central) para cada variável. Assim, para  $n$  variáveis envolvidas no estudo, o número de experimentos que devem ser realizados para investigar todas as combinações possíveis é igual a  $2^n$ .

Com os resultados obtidos do planejamento fatorial é possível calcular os efeitos principais e de interação das variáveis de interesse (fatores) sobre as respostas, determinando assim quais são os efeitos mais significativos e o seus respectivos modos de influenciar as respostas.

Dessa forma, realizou-se uma análise de sensibilidade das variáveis de operação do reator catalítico de leito fixo sobre o perfil de temperatura, utilizando-se a metodologia de planejamento fatorial completo, cuja descrição acerca de seu procedimento de cálculo dos efeitos e aplicações são mostrados em Box et al. (1978), Bruns (1993), Barros Neto et al. (1995), Rodrigues (1996a) e Toledo (1997).

O planejamento fatorial completo para o reator catalítico de leito fixo visou a determinação dos efeitos principais que as seguintes variáveis:

- temperatura de alimentação do reator,  $T_{fo}$ ;
- temperatura do fluido refrigerante,  $T_r$ ;
- razão de alimentação de ar/ etanol,  $R$ ;
- velocidade de fluxo mássico,  $GM$  ( $G_i$ ).

exercem sobre os perfis das temperaturas axiais do reator. Estas temperaturas foram avaliadas nos pontos de colocação axial do reator, isto é, valor radial médio numa determinada posição axial do reator.

A conversão do reator não pode ser medida em tempo real na prática, portanto, esta variável não pode ser controlada diretamente. Então, através do controle de temperatura faz-se o controle indireto da conversão. Portanto, o método foi aplicado somente sobre o perfil de temperatura do reator, pois as informações obtidas pelo planejamento fatorial são fundamentais para a elaboração de uma estratégia de controle.

Como se utilizou 7 pontos de colocação axial ao longo do reator, fez-se o estudo de interações nestes 7 pontos, tendo assim o conhecimento dos efeitos ao longo da direção axial do sistema.

Por apresentar uma natureza dinâmica esses efeitos foram determinados em função do tempo, isto é, procedeu-se ao cálculo do perfil dos efeitos entre

as variáveis citadas anteriormente ao longo do processo dinâmico do sistema até este alcançar um novo regime estacionário. Não foi encontrado na literatura consultada sobre reatores de leito fixo uma aplicação semelhante, ou seja, no regime transiente.

O estudo do planejamento fatorial foi realizado para o modelo bidimensional de Toledo e Maciel Filho com propriedades físicas e coeficientes de transferência variantes, temperatura do fluido refrigerante e perfil de pressão constantes ao longo do reator. Este estudo poderia ser realizado também com o modelo baseado em Jutan et al.. No entanto, como este modelo apresentou resultados para o comportamento dinâmico do reator semelhantes qualitativamente ao modelo de Toledo e Maciel Filho, as conclusões obtidas seriam semelhantes as apresentadas.

Na Tabela V.1 a seguir estão contidos os níveis assumidos aos fatores estudados, isto é, as variáveis cujos efeitos serão determinados para o modelo do reator. Já na Tabela V.2 está a matriz do planejamento fatorial completo, ressaltando-se a existência de 16 condições diferentes de simulações, uma vez que foram selecionadas 4 variáveis cujos efeitos serão estimados.

Variável	Nível Inferior ( -1 )	Ponto Central ( 0 )	Nível Superior ( + 1 )
Tfo	425.15 K	435.15 K	430.15 K
Tr	425.15 K	435.15 K	430.15 K
R	15	25	20
GM	3500 kg/h	5500 kg/h	4500 kg/h

Tabela V.1 - Níveis dos Fatores Estudados no Modelo Bidimensional.

Em seguida são apresentados as figuras dos efeitos principais das variáveis de operação somente para os três primeiros pontos de colocação axial do modelo bidimensional, deixando para a parte da discussão dos resultados os comentários gerais para os demais pontos do reator. Com relação aos efeitos de interação, estes somente serão comentados nas conclusões finais do capítulo.

Ensaio	Tfo	Tr	GM	R
1	-1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1	-1
3	-1	+1	-1	-1
4	+1	+1	-1	-1
5	-1	-1	+1	-1
6	+1	-1	+1	-1
7	-1	+1	+1	-1
8	+1	+1	+1	-1
9	-1	-1	-1	+1
10	+1	-1	-1	+1
11	-1	+1	-1	+1
12	+1	+1	-1	+1
13	-1	-1	+1	+1
14	+1	-1	+1	+1
15	-1	+1	+1	+1
16	+1	+1	+1	+1

Tabela V.2 - Matriz do Planejamento Fatorial Completo

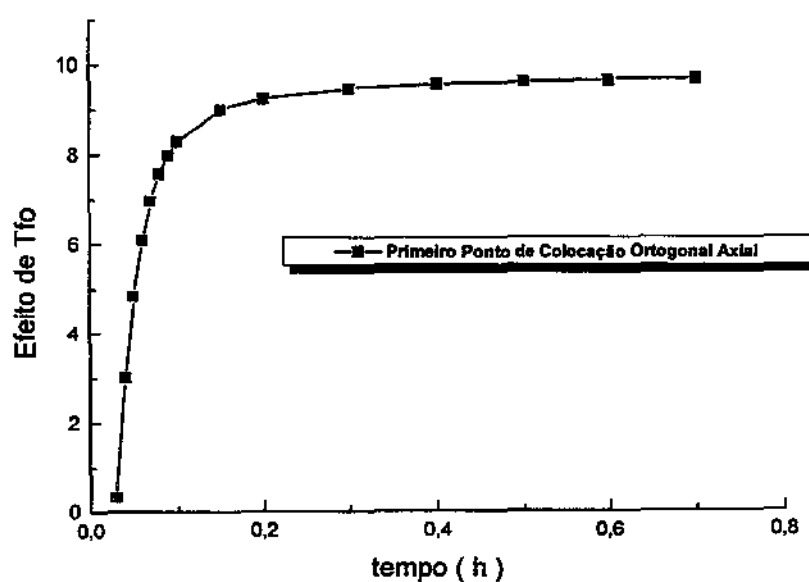


Figura V.1 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro Tfo

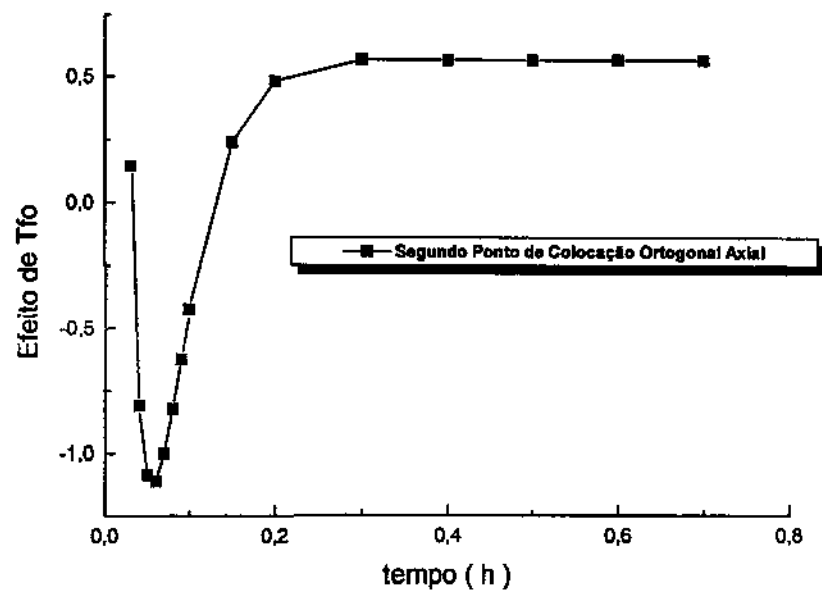


Figura V.2 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro Tfo

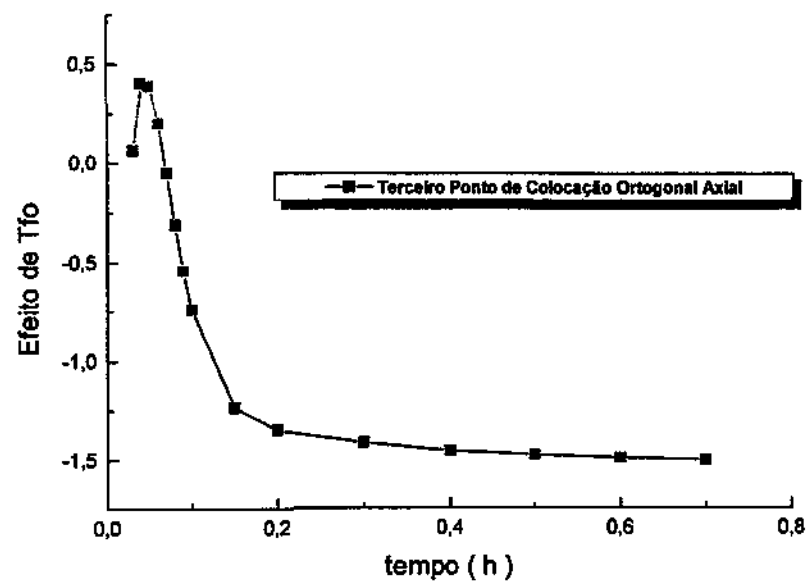
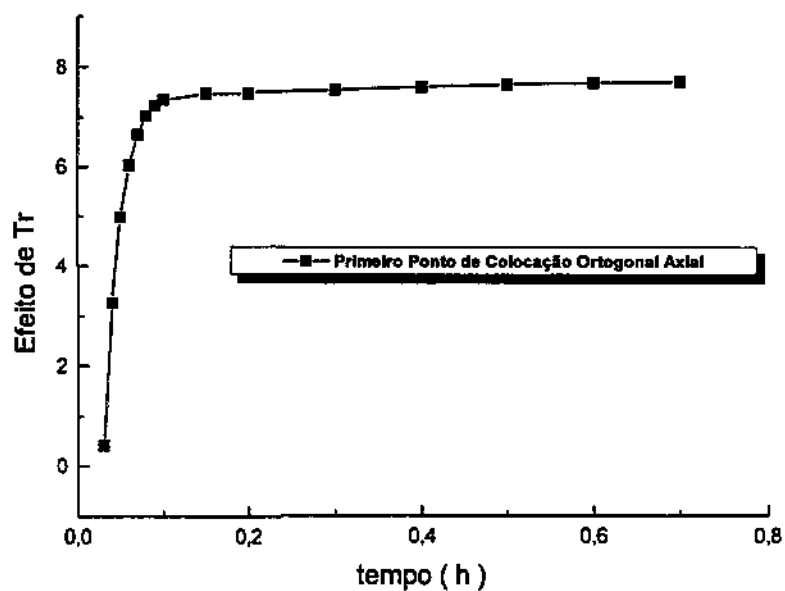
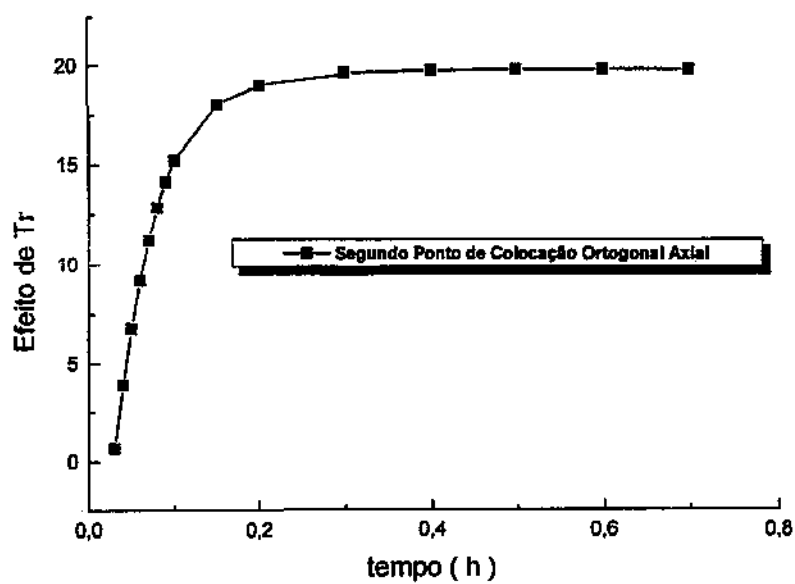


Figura V.3 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro Tfo

Figura V.4 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro  $Tr$ Figura V.5 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro  $Tr$



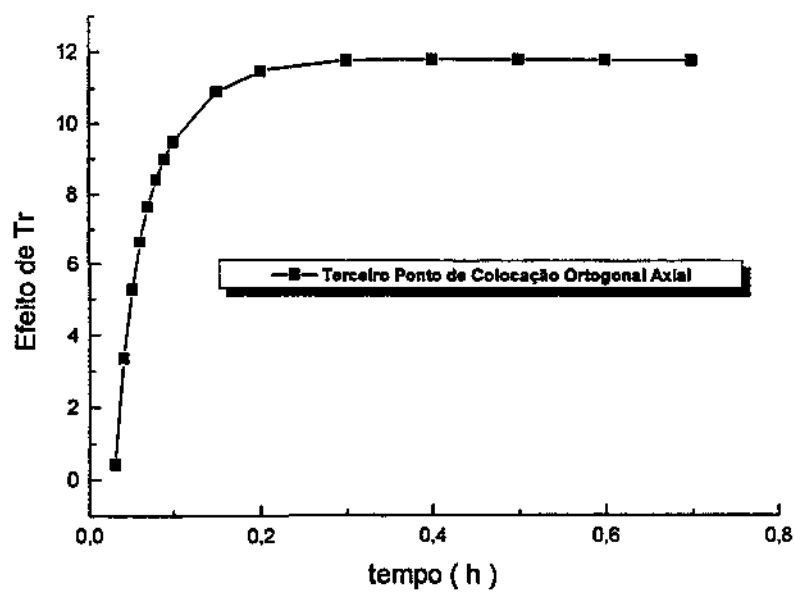


Figura V.6 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro Tr

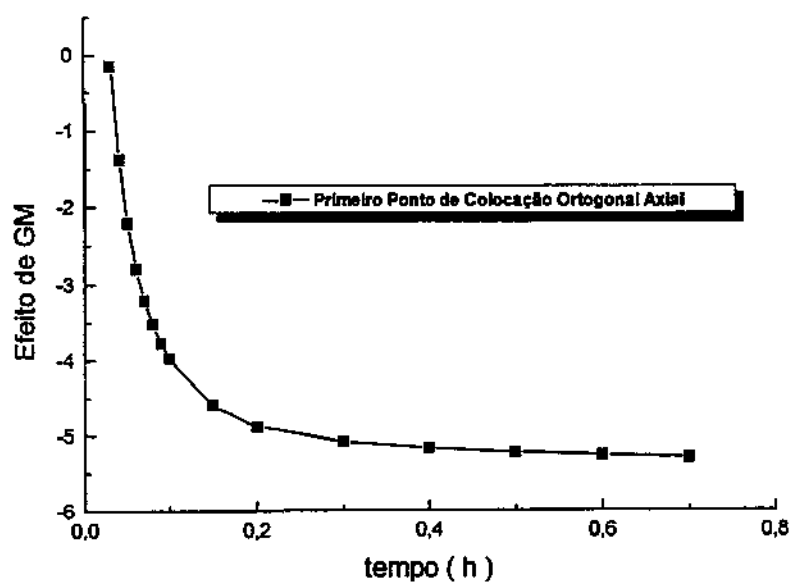


Figura V.7 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro GM

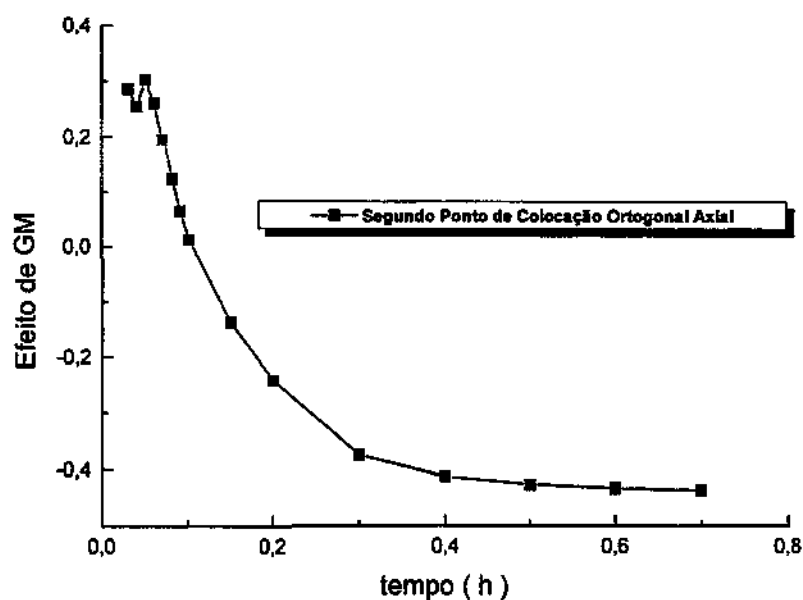


Figura V.8 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro GM

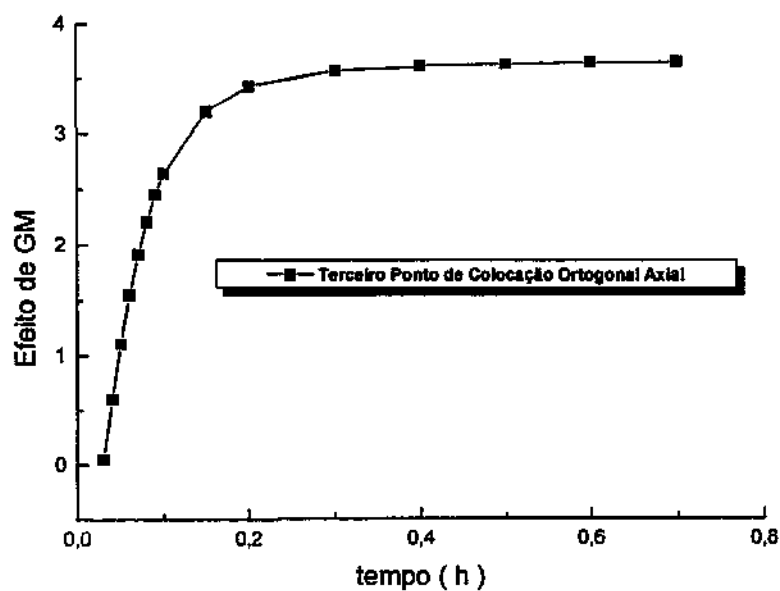


Figura V.9 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro GM

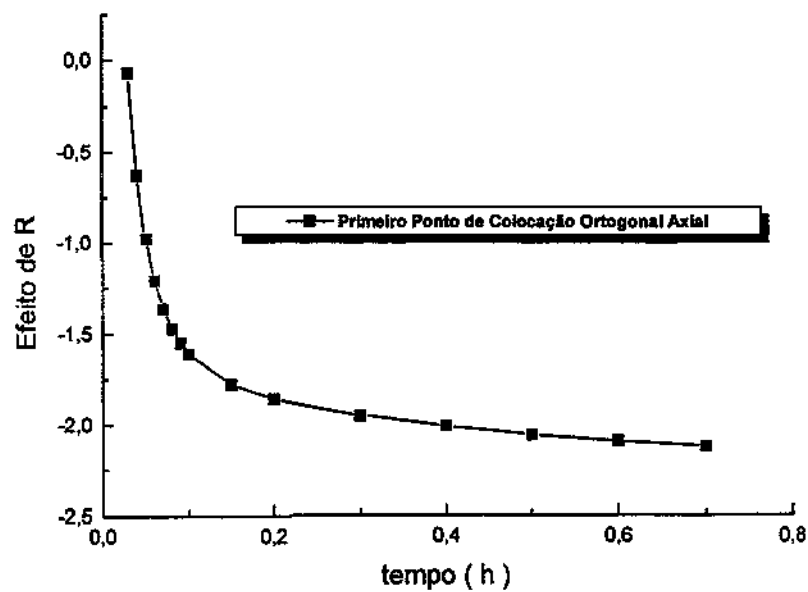


Figura V.10 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro R

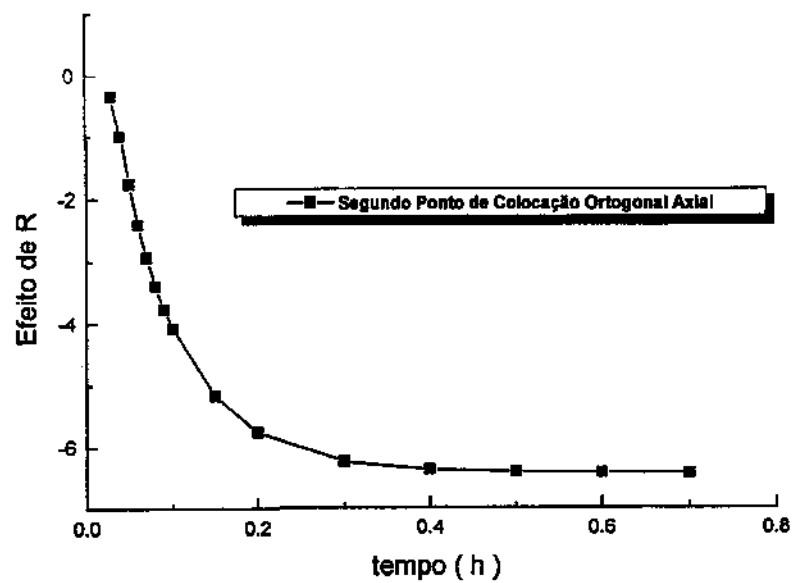


Figura V.11 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro R

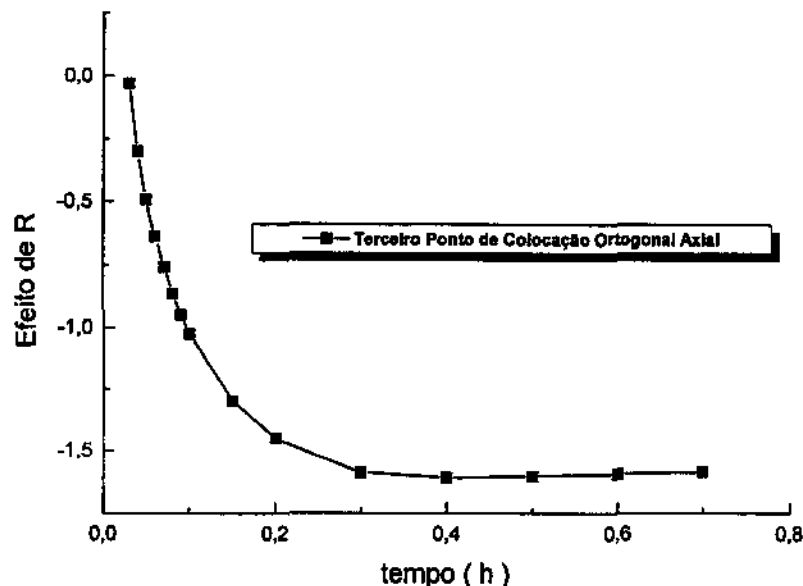


Figura V.12 - Perfil Dinâmico do Efeito Principal do Parâmetro R

Na continuação serão discutidos os efeitos que cada fator exerce sobre as respectivas temperaturas axiais, fazendo-se desta forma, uma análise da sensibilidade que cada temperatura axial possui em relação aos fatores analisados.

Deve-se também enfatizar que os resultados e as conclusões obtidas deste método não devem ser generalizadas para o sistema, pois os resultados obtidos foram gerados pelas permutações dos parâmetros indicados na Tabela V.1 conforme a Tabela V.2.

Deve-se extrair dos resultados obtidos, possíveis tendências das influências dos fatores analisados, nunca deixando de considerar a análise das simulações dinâmicas apresentadas no Capítulo IV para poder realizar uma conclusão mais elaborada e segura. Adicionalmente, ao se analisar os resultados deve-se ter em mente que o comportamento dos efeitos não refletem necessariamente o comportamento do sistema, e sim representam como a intensidade do efeito de um determinado parâmetro se comporta ao longo do tempo numa determinada posição axial do reator.

### Temperatura de Alimentação, $T_{fo}$

O efeito do parâmetro  $T_{fo}$  sobre as temperaturas axiais estudadas se apresentou diferente para cada ponto do reator, como pode ser observado pelas Figuras V.1 à V.3.

Outra questão importante, é que o efeito em determinados pontos do reator muda de sinal ao longo do tempo, resultado este, provavelmente decorrente do fenômeno de resposta inversa, o qual é gerado quando este parâmetro é perturbado. Este fato confirma as conclusões do Capítulo IV, onde pela observações dos resultados, quando este parâmetro é perturbado, ocorre o fenômeno da resposta inversa no reator em certos pontos do mesmo.

Portanto, estes resultados conjuntamente com os obtidos nas simulações dinâmicas mostram que este parâmetro não é o mais indicado para se utilizar como variável manipulada num sistema de controle.

### **Temperatura de Refrigeração, $T_r$**

Já o parâmetro  $T_r$  se comporta de maneira uniforme para todos pontos estudados, além de ser o parâmetro com o maior efeito sobre o reator, possibilitando a sua utilização como variável manipulada num sistema de controle apesar das dificuldades práticas mencionadas. Também deve-se ressaltar que os efeitos de interação, embora não apresentados, tiveram valores próximos em certos casos aos efeitos primários dos parâmetros  $T_{fo}$ ,  $GM$  e  $R$ , mas sempre inferiores aos da temperatura do fluido refrigerante,  $T_r$ . O qual apresentou sempre os efeitos de maiores intensidades.

Os efeitos deste parâmetro podem ser observados nas Figuras V.4 à V.6.

### **Velocidade de Fluxo Mássico, $GM$**

Com relação ao efeito da velocidade de fluxo mássico,  $GM$ , sobre o reator, este se comporta de maneira diferente para cada ponto analisado, além de mudar de sinal em determinados pontos. Também sua intensidade não é muito grande, indicando pouca sensibilidade do processo frente a este parâmetro.

Estes resultados são confirmados quando se observa o comportamento dinâmico do processo no Capítulo IV. Esta variável pode ser usada como variável manipulada em certos pontos do reator onde não ocorra mudança de sinal do seu efeito primário e cuja magnitude seja suficiente para influenciar o reator. Os resultados dos efeitos de  $GM$  podem ser observados nas Figuras V.7 à V.9.

Outro fator importante na análise deste parâmetro é que pela observação dos resultados obtidos no Capítulo IV, nota-se que o reator é pouco sensível à GM, sendo necessárias perturbações de 70 à 80% no seu valor para efetivamente influenciar o reator. Portanto, quando se definiu os níveis dos parâmetros para se realizar o planejamento fatorial não foi possível incluir perturbações dessa magnitude, pois todos os parâmetros são perturbados no planejamento fatorial. Desta forma, os resultados obtidos para os efeitos de GM foram de certa forma mascarados quanto à intensidade. Por isso, para se ter uma boa idéia da sua influência há necessidade de analisar também os resultados obtidos no Capítulo IV.

### **Razão de Alimentação de Ar/Etanol, R**

O comportamento do efeito de R sobre o reator, Figuras V.10 à V.12, apresentou um comportamento com troca de sinal em alguns pontos e um alto efeito no segundo ponto de colocação. Pela análise da magnitude deste último, ele foi o que apresentou maior valor depois dos efeitos de Tr, indicando através deste método que este parâmetro conjuntamente com Tr seriam os mais indicados para variáveis manipuladas numa malha de controle multivariável.

No entanto, devido à magnitude do efeito neste ponto ser maior que os dos GM, pelos mesmos motivos mencionados, não foi possível realizar altas perturbações em GM quando na realização dos ensaios, levando a conclusão pela observação dos resultados que o parâmetro R é mais influente para perturbar o reator do que GM.

Outro fato é que este parâmetro tem forte influência no reator só num sentido, isto é, o parâmetro R só influencia o sistema quando é diminuído. Quando o mesmo é aumentado tem pouca influência no reator. Portanto, o R pode ser usado como variável manipulada somente para aumentar a temperatura no segundo ponto de colocação, fato este observado somente pelas simulações dinâmicas e mascarados pelo planejamento fatorial, pois os dados fornecidos pelo planejamento fatorial não possibilitam saber se uma variável influencia somente num sentido um sistema. Esta dificuldade é provavelmente devida as não-linearidades e complexidades do comportamento dinâmico do reator estudado.

Quando se efetuou o estudo de sensibilidade em malha aberta o parâmetro GM se comportou melhor que R no sentido de influenciar o reator, levando a um conclusão conflitante com o método do planejamento fatorial. Isto aconteceu porque o planejamento fatorial foi realizado dentro de uma

região operacional dos parâmetros que não possibilitou indentificar melhor esta característica. Então, é sugerido compreender os resultados obtidos pelo planejamento fatorial como prováveis tendências, mas sem jamais substituir completamente a análise de sensibilidade através da simulação dinâmica, onde um parâmetro é variado tanto positivamente como negativamente, com diferentes magnitudes, e os outros parâmetros são fixados.

### V.3 – Conclusões

O método do planejamento fatorial permite compreender os efeitos dos parâmetros de um determinado sistema, possibilitando conhecer não só os valores dos efeitos primários, como também os efeitos de interação destes parâmetros, efeitos secundários. Este conhecimento ajuda na elaboração de uma adequada estratégia de controle para o sistema estudado, no caso o reator catalítico de leito fixo.

Outro fator importante deste método é que ele possibilita o conhecimento do efeito ao longo do tempo, permitindo observar o comportamento dinâmico dos efeitos.

Finalmente, pode-se concluir que o método do planejamento fatorial completo é uma ferramenta adequada para análise dos efeitos e também das interações dos parâmetros operacionais de um processo químico, mas que não deve ser generalizado para regiões de operação não estudadas.

Com relação aos efeitos de interação dos parâmetros operacionais do reator, estes apresentam valores em determinadas posições axiais do reator superiores aos efeitos primários de  $T_{fo}$ ,  $GM$  e  $R$ . Portanto, o método do planejamento fatorial mostra que quando estes parâmetros foram utilizados como variáveis manipuladas numa malha de controle terão o seu efeito reduzido ou prejudicado em determinados momentos devido a alteração ou perturbação de algum outro parâmetro operacional. Efeito este decorrente da interação destes parâmetros.

O único parâmetro que tem uma maior independência com relação ao seu comportamento é a temperatura de refrigeração,  $Tr$ , por ter o seu efeito principal superior em valor a todos outros efeitos primários e de interações. Portanto, as conclusões obtidas pelo método do planejamento fatorial concordam com os resultados do Capítulo IV, em que o parâmetro mais adequado para se utilizar como variável manipulada numa malha de controle é a temperatura de refrigeração,  $Tr$ .

Mais detalhes consultar Toledo (1997), Toledo e Maciel Filho(1997d, 1999c).

## CAPÍTULO VI – CONTROLE DE REATORES DE LEITO FIXO

### VI.1 - Introdução

O estudo do controle de reatores químicos de leito fixo vem sendo desenvolvido ao longo de vários anos em diversas universidades e instituições científicas. O tema está longe de ser esgotado por não se tratar de um único, mas de uma variedade grande de processos com particularidades distintas.

As características das reações químicas, que podem ser múltiplas, em série e em paralelo, reversíveis ou não, ocorrerem numa ou em várias fases, geram ou consomem energia, o que contribui para aumentar a diversidade de tipos de reatores de leito fixo. Outros fatores, que os distinguem, estão relacionados com sua geometria e os mecanismos de transporte de massa e energia. Para aumentar ainda mais o número de alternativas, existem múltiplos objetivos de controle do reator, por exemplo: prioridades econômicas, de segurança, de qualidade do produto desejado ou todos ao mesmo tempo. Além disso, os reatores químicos de leito fixo apresentam um comportamento que dificulta sobremaneira seu controle. Dentre estas particularidades, listam-se:

- indisponibilidade, na maioria dos casos da medição em tempo real da variável mais importante do processo químico: a concentração dos compostos;
- resposta inversa de algumas variáveis dependentes, em relação às variações de certas variáveis independentes;
- tempo morto associado à velocidade de propagação da onda térmica ao longo do leito;
- acoplamento não-linear entre os processos cinéticos e energéticos;
- parâmetros físico-químicos que variam no espaço e no tempo.

Para o estabelecimento da estratégia de controle de um reator químico é preciso definir seu objetivo operacional. Ambos estão estritamente relacionados. Um reator químico opera exclusivamente para mudar a composição de uma ou mais substâncias. Normalmente a concentração da carga do reator não é fixa, variando dentro de uma faixa de valores prováveis.



Deseja-se que o reator opere de forma a tornar a concentração na saída compatível com o valor especificado pela qualidade do produto a ser fabricado. Isso pode ser conseguido, porque o reator é projetado com folgas de dimensionamento que permitem a alteração dos valores das variáveis operacionais: pressão, temperatura, razão molar entre os reagentes na alimentação, etc.

A tarefa do sistema de controle consiste em realizar a modificação adequada de uma ou mais dessas variáveis, segundo o grau de liberdade do processo, a fim de garantir a qualidade do produto. Nesta ação o controlador precisa primeiramente manter o processo em regime de operação estável. A segunda prioridade é levar o reator para um novo regime operacional sempre que isto for desejado.

No caso deste trabalho, a prioridade do controle não é diretamente com relação a concentração dos produtos e sim com o controle térmico do sistema, fazendo-se indiretamente, o controle da concentração do sistema, através de medições de temperatura. Para isto os controladores são avaliados no sentido de absorver perturbações das cargas que alteram o perfil térmico do reator, como também alterar o perfil de temperatura do mesmo, controle servo.

Para os estudos de controle utilizou-se o reator catalítico de leito fixo, no qual ocorre a reação de oxidação do etanol a acetaldeído; reação fortemente exotérmica e característica de muitos processos industriais. Portanto, o sistema apresenta duas grandes dificuldades que possibilitam avaliar o desempenho de um algoritmo de controle adequadamente: a forte liberação de calor (reação exotérmica) e a natureza distribuída do sistema (conversão e temperatura do reator variam no espaço e no tempo). Estas características levam a ocorrência de gradientes de concentração e temperatura ao longo do reator, o aparecimento de pontos de máxima temperatura (ponto quente), a ocorrência do fenômeno da resposta inversa e alta sensibilidade do reator frente a perturbações nos parâmetros operacionais do reator. Características estas que tornam o controle do reator um objetivo difícil de ser alcançado e um ambiente adequado para avaliar o desempenho de estratégias e algoritmos de controle. Mais detalhes sobre o controle de reatores exotérmicos e distribuídos consultar Luyben (1966), McGreavy (1983), Maciel Filho (1989), Froment e Bischoff (1990), Windes e Ray (1992a, 1992b) e Ogunnaike e Ray (1994).

Os algoritmos de controle avaliados neste trabalho foram o clássico PI, os preditivos de longo alcance DMC e GPC e o adaptativo preditivo STGPC. O algoritmo clássico foi escolhido devido ao seu grande emprego e por ser esta ainda a referência com a qual deve ser comparado qualquer controlador.

Devido ao fato de se utilizar controle digital, foi implementada uma versão digital do controlador PI, o algoritmo de velocidade, Toledo (1992). O DMC e o GPC foram escolhidos dentre os algoritmos preditivos pela sua robustez, flexibilidade de ajuste devido à presença de vários parâmetros e indicações sugeridas na literatura, Pinto (1990), Ender (1990) e Toledo (1992). Além destes controladores, fez-se uso também do algoritmo de controle adaptativo preditivo STGPC, o qual provem do acoplamento do GPC e da técnica de identificação “on-line” dos mínimos quadrados recursivos, “RLS”, com fator de esquecimento variável escalar, Toledo (1992). Portanto, de posse dos algoritmos preditivos e adaptativos os quais são indicados para sistemas não-lineares, variantes ao longo do tempo e com restrições operacionais nas variáveis do processo, foi possível fazer um estudo detalhado do sistema em malha fechada. Ambos os algoritmos foram avaliados tanto na forma monovariável, SISO, como na forma multivariável, MIMO.

Explorou-se assim um conjunto bem razoável de algoritmos de controle, permitindo obter uma maior compreensão sobre a natureza e as principais características do sistema estudado sob malha fechada em relação as características inerentes de cada um destes controladores. Os parâmetros dos controladores foram ajustados de forma empírica através de extensivas simulações uma vez que não se tem um procedimento definitivo para a definição numérica destes parâmetros. Para efeito de comparação entre os algoritmos, utilizou-se como critério de desempenho a integral do erro absoluto:

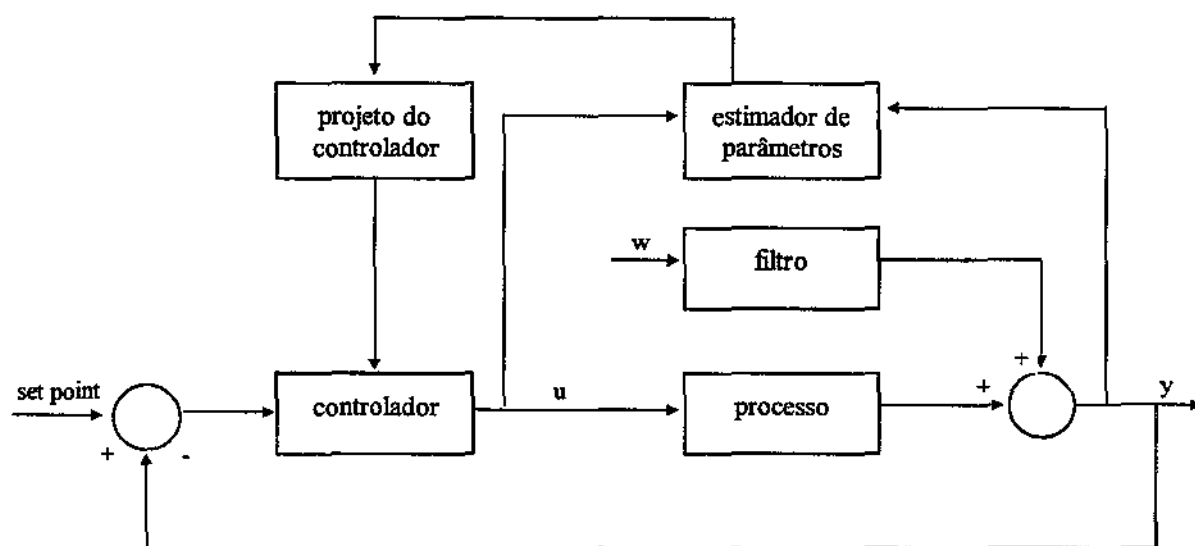
$$IAE = \int_0^{\infty} |e(t)| dt \quad (VI.1)$$

Observa-se na Figura VI.1 um diagrama de blocos genérico de um controlador adaptativo que permite visualizar a estrutura em malha fechada do reator catalítico de leito fixo, possibilitando um bom entendimento da estrutura de controle utilizada neste trabalho.

A seguir far-se-á a apresentação dos algoritmos de controle utilizados, iniciando com a descrição do algoritmo PID clássico, seguido dos algoritmos preditivos DMC e GPC, e por último, o algoritmo adaptativo preditivo, STGPC. Os algoritmos são descritos sucintamente, ficando a descrição detalhada nos Apêndices VIII e IX.

Mais detalhes sobre o controle em geral e aplicações de controladores avançados em reatores catalíticos de leito fixo consultar as seguintes referências: Bonvin et al. (1980), Iserman (1981), Desphande e Ash (1981),

McGreavy (1983), Stephanopoulos (1984), Smith e Corripio (1985), Seborg et al. (1986), McDermott et al. (1986), Bolzan (1986), Desphande (1989), Seborg et al. (1989), Maciel Filho (1989), Luyben (1990), Chen e Sun (1991), Patwardhan et al. (1992), Carneiro (1992), Ogunnaike e Ray (1994), Wright e Edgar (1994) e Doyle et al. (1996).



**Figura VI.1 – Diagrama de Blocos de um Controlador Adaptativo**

## VI.2 - PID

Devido ao fato de se utilizar controle digital, foi implementada uma versão digital do algoritmo PID. A versão utilizada foi a do algoritmo de velocidade, na qual o controlador só determina a variação da variável manipulada em relação a último valor calculado:

$$u(k) = u(k-1) + q_0 e(k) + q_1 e(k-1) + q_2 e(k-2) \quad (\text{VI.2})$$

onde:

$u(k)$  = variável manipulada;  
 $e(k)$  = "set point" - variável controlada;  
 $q_0, q_1$  e  $q_2$  = parâmetros do controlador;

Os parâmetros  $q_0$ ,  $q_1$  e  $q_2$ , os quais foram considerados invariantes no tempo, devem ser determinados de maneira a se obter um bom desempenho para o sistema controlado.

Mais detalhes sobre o desenvolvimento matemático para obter a equação (VI.2) encontra-se no Apêndice VIII.

### VI.3 - DMC

Como já antecipado, uma das formas de manter a qualidade do controle num sistema é o uso de controladores robustos.

O controle preditivo com horizonte de longo alcance constitui uma alternativa com essa característica. São várias as formas apresentadas na literatura para este tipo de algoritmo. Desse conjunto escolheu-se trabalhar com o DMC (“Dynamic Matrix Control”) e o GPC (“Generalized Predictive Control”), o qual será discutido a seguir. O algoritmo DMC para representar o processo usa o modelo de convolução. Objetivo da lei de controle preditivo é dirigir as saídas futuras da planta para a trajetória de referência. Para isto, minimiza-se um critério de custo quadrático. A lei de controle do DMC resultante é expressa da seguinte forma, Pinto (1990):

$$\bar{\underset{\sim}{u}} = \left( \underset{\sim}{G'}^T \underset{\sim}{G'} + \lambda \underset{\sim}{I} \right)^{-1} \underset{\sim}{G'}^T \underset{\sim}{E'} \quad (\text{VI.3})$$

onde:

$\underset{\sim}{E'}$  = vetor do desvio predito da saída com respeito à trajetória desejada;

$\underset{\sim}{G'}$  = matriz dinâmica do sistema;

$\lambda$  = fator de supressão de movimento;

$\bar{\underset{\sim}{u}}$  = vetor de ação de controle ao longo do horizonte de controle;

Somente o primeiro elemento do vetor  $\bar{\underset{\sim}{u}}$  será implementado no processo, determinando a ação de controle corrente:

$$u(t) = u(t-1) + \Delta u(t) \quad (\text{VI.4})$$

Mais detalhes sobre o desenvolvimento matemático do DMC consultar o Apêndice IX.

#### VI.4 - GPC

O GPC (“Generalized Predictive Control”) devido aos mesmos motivos descritos para o DMC, foi também escolhido para o controle do reator. Além do que, este algoritmo possibilita, pelo tipo de modelo interno utilizado, a facilidade de alterar sua configuração para um comportamento adaptativo. Este algoritmo usa o modelo paramétrico CARIMA ou o proposto por Souza Júnior (1989) para a representação do processo, o qual considera os efeitos estocásticos do meio.

Como dito anteriormente, objetivo da lei de controle preditivo é dirigir as saídas futuras da planta para a trajetória de referência. Para isto, minimiza-se um critério de custo quadrático. A lei de controle resultante é semelhante ao DMC e é expressa da seguinte forma:

$$\bar{\underset{\sim}{u}} = \left( \underset{\sim}{G'}^T \underset{\sim}{G'} + \lambda \underset{\sim}{I} \right)^{-1} \underset{\sim}{G'}^T \begin{bmatrix} \underset{\sim}{w} - \underset{\sim}{y}^0 \\ \underset{\sim}{\phantom{w}} \\ \underset{\sim}{\phantom{w}} \end{bmatrix} \quad (\text{VI.5})$$

onde:

$\underset{\sim}{G}'$  = matriz dinâmica do sistema;

$\lambda$  = fator de supressão de movimento;

$\bar{\underset{\sim}{u}}$  = vetor de ação de controle ao longo do horizonte de controle;

$\underset{\sim}{w}$  = vetor de trajetória de referência ao longo do horizonte de controle;

$\underset{\sim}{y}^0$  = vetor de predição para a variável controlada baseado em dados conhecidos no tempo k.

Novamente, somente o primeiro elemento do vetor  $\bar{\underset{\sim}{u}}$  será implementado no processo, determinando com isso a ação de controle corrente:

$$u(t) = u(t - 1) + \Delta u(t) \quad (\text{VI.6})$$

Detalhes sobre estratégias de controle, modelo interno e descrição do algoritmo estão no Apêndice IX.

## VI.5 - STGPC

O controle auto-ajustável é uma opção bastante interessante quando se trata com processos não-lineares ou variantes no tempo, como no caso de processos químicos.

Os parâmetros do modelo interno, que permitem representar a dinâmica do processo, podem não satisfazer as exigências necessárias para um controle eficaz durante um período longo de operação, como o caso do controle não auto-ajustável.

A extensão à forma auto-ajustável tem por objetivo contornar estes problemas apresentados pelos processos químicos, garantindo uma boa representação dinâmica através do seu modelo interno, e, conseqüentemente, um controle efetivo. Portanto, no controle auto-ajustável a matriz  $G'$ , será calculada a cada instante de amostragem.

O GPC foi estendido à forma adaptativa, STGPC, através do acoplamento da técnica de identificação “on-line” dos mínimos quadrados recursivos, “RLS”, com fator de esquecimento variável escalar, Toledo (1992).

Mais detalhes sobre estratégias de controle, modelo interno e descrição do algoritmo estão no Apêndice IX.

## VI.6 - Controle Monovariável - SISO

O controle dos estados, no caso temperatura, de um determinado ponto axial do reator catalítico de leito fixo é dificultado pelo acoplamento dos pontos do reator, perfis axiais, devido a característica distribuída do sistema. Portanto, quando se altera um determinado ponto do reator os demais também sofrem influência. Então, quando pretende-se mudar os valores de operação, mudança de “set point”, de um determinado ponto, caso SISO, ou de dois pontos, MIMO, deve-se ter em mente que nem todas as variações são possíveis, pois há restrições intrínsecas dos perfis axiais do reator. Outra limitação que ocorre no sistema é que as variáveis manipuladas afetam diferentemente cada ponto do reator e possuem ganhos muito diferentes, o

que dificulta a manipulação das mesmas sem eventualmente levar à instabilidade do reator ou a operação em condições não desejadas.

Com relação ao controle monovariável, nas figuras apresentadas no Capítulo IV, observou-se o comportamento dinâmico, inclusive o fenômeno da resposta inversa, dos modelos bi e unidimensionais frente à perturbações degrau na temperatura de alimentação do reator,  $T_{fo}$ , na temperatura do fluido refrigerante,  $T_r$ , na velocidade de fluxo mássico,  $GM$ , e na relação de alimentação ar/etanol,  $R$ . Os efeitos da variação das propriedades físicas, coeficientes de transferência de calor e massa, temperatura do fluido refrigerante e pressão no comportamento dinâmico do sistema também foram apresentados, os quais mostraram em certas situações levar à um comportamento dinâmico do reator em certas posições axiais diferente de quando se considera os termos citados constantes. No entanto, quando se utiliza o modelo sem a variação dos termos anteriores, não há comprometimento para análise do desempenho dos algoritmos de controle, além de reduzir o tempo computacional para a solução do sistema em malha fechada.

Pode-se também concluir do Capítulo IV que os modelos reduzidos tiveram uma boa concordância com o modelo bidimensional, além de reduzir de maneira significativa o tempo computacional exigido para a sua solução. Portanto, fez-se os estudos de controle apresentados neste capítulo, utilizando-se o modelo bidimensional de Toledo e Maciel Filho com um ponto de colocação radial interno. Além disso, considerou-se os parâmetros do modelo constantes, sem perfil de pressão ao longo do reator e temperatura do fluido refrigerante,  $T_r$ , como parâmetro operacional. O motivo da consideração da temperatura do fluido refrigerante constante se deve ao fato dos reatores catalíticos de leito fixo industriais operarem com vazões muito altas do mesmo, o que provoca pequena variação desta temperatura ao longo do reator. Desta forma foi possível realizar a análise de desempenho dos algoritmos de controle de maneira confiável e rápida, sendo no entanto necessário ressaltar que para implementações em processos existentes, o uso de modelos com as variações nas propriedades físicas é recomendado.

As variáveis manipuladas escolhidas foram a temperatura de refrigeração,  $T_r$ , a velocidade de fluxo mássico,  $GM$ , e a relação de alimentação ar/etanol,  $R$ . A temperatura de refrigeração apresenta um comportamento uniforme ao longo do reator para perturbações degrau positivas e negativas de diferentes intensidades. Isto é, com o aumento de  $T_r$  as temperaturas na direção axial do reator aumentam.

Com relação a GM, o comportamento é diferente, pois conforme a posição axial do reator, a temperatura varia de maneira diferente frente a variações degrau nesta variável operacional, podendo inclusive num mesmo ponto do reator, conforme a intensidade da perturbação, se comportar de maneira diferente, o que evidencia limitações e cuidados quanto ao uso de GM como variável manipulada. Além disso, conforme o ponto axial do reator, há a possibilidade de ocorrência de resposta inversa quando perturbações são impostas. E a relação de alimentação ar/etanol, R, se mostra influente somente quando é reduzida. Portanto, todas estas características do sistema proporcionam um excelente ambiente para avaliação do desempenho de qualquer controlador.

As Figuras VI.2 à VI.5, a seguir, apresentam o problema do controle supervisão utilizando como variável manipulada a temperatura do fluido refrigerante,  $T_r$ , as Figuras VI.6 e VI.7 o mesmo problema utilizando a velocidade de fluxo mássico como variável manipulada, GM, e as Figuras VI.8 e VI.9 a relação de alimentação ar/etanol, R, como variável manipulada. Todas as figuras mostram a superioridade dos controladores preditivos e adaptativo preditivo frente ao controlador clássico. Com relação aos controladores avançados há uma superioridade dos controladores GPC e STGPC frente ao controlador DMC. Uma hipótese provável seja devido a diferença de modelo interno utilizada pelos mesmos. O GPC e o STGPC utilizam um modelo interno paramétrico, enquanto o DMC utiliza um modelo de convolução, levando a uma maior imprecisão do processo devido ao modelo interno utilizado.

No entanto, o DMC apresentou uma variação da variável manipulada mais suave em relação aos controladores GPC e STGPC. Deve-se também considerar que os controladores avançados utilizaram parâmetros de ajuste semelhantes a fim de proporcionar uma base de comparação, entretanto, parâmetros que proporcionam maior velocidade na resposta do DMC e variações mais brandas nas variáveis manipuladas para o GPC e STGPC podem também eventualmente ser encontrados.

O problema do controle regulatório é apresentado nas Figuras VI.10 à VI.13 utilizando como variável manipulada  $T_r$ , nas Figuras VI.14 e VI.15 utilizando a velocidade de fluxo mássico, GM, e nas Figuras VI.16 e VI.17 com R. Novamente a superioridade dos controladores preditivos e adaptativo fica evidenciada, principalmente do GPC e STGPC.

Finalmente, com relação a perturbação degrau e adição de um ruído estocástico em  $T_{fo}$ , Figuras VI.18 e VI.19, e ao problema da desativação catalítica, Figuras VI.20 à VI.22, as mesmas conclusões são observadas.



Estudos da desativação do catalisador de Fe-Mo, Maciel Filho et al. (1990), indicam a redução das taxas de reação. Para numericamente ter-se o efeito da desativação do catalisador multiplicou-se a taxa de reação por uma constante. Quando a constante é igual a 1 não há desativação, e quando é 0.7 a desativação é 30%. Portanto, é uma representação de uma função do tipo degrau, o que não representa a realidade de uma desativação catalítica usual, porém está de acordo com os resultados experimentais obtidos por Maciel Filho (1985). Foi possível então avaliar a capacidade dos algoritmos de controle em tentar restaurar a conversão no final do reator da maneira mais drástica.

A estratégia de controle para superar o problema da desativação catalítica adotada no caso monovariável, foi aumentar a temperatura no segundo ponto de colocação axial com a finalidade de aumentar a conversão no final do reator. Esta estratégia se mostrou satisfatória, pois pela observação da Figura VI.20 verifica-se a restauração do valor da conversão no final do reator ao valor inicial desejado para uma taxa de reação 50% da inicial.

Outra questão que merece esclarecimento é com relação as restrições impostas às variáveis manipuladas. Elas foram colocadas fora do algoritmo de controle, portanto, são restrições operacionais. Isto é, foi estabelecido um limite superior e inferior no qual terá seu valor atualizado se a variável manipulada calculada pelo controlador ultrapassar estes limites.

Esta restrição não é um procedimento matemático rigoroso, que leve ao valor ótimo da variável manipulada num determinado momento, mas em certas situações se apresentou satisfatória. No entanto, este tipo de restrição pode levar a saturação do valor da variável manipulada num determinado limite ocasionando a ocorrência de “off set” na variável controlada do reator. Por outro lado, é um procedimento que confere uma segurança adicional a ação do controle em plantas operadas por computador, inclusive podendo-se adequar as restrições de equipes de segurança. A saturação do controlador é um fenômeno físico e sempre vai ocorrer.

Estratégias mais sofisticadas utilizando algoritmos de otimização com restrição são encontradas na literatura, mas estes algoritmos eventualmente também podem levar a problemas de oscilações e saturação do valor das variáveis nas restrições impostas ao controlador. Portanto, para uma análise segura deve-se sempre implementar uma determinada estratégia e algoritmo de controle no sistema a ser estudado para se ter certeza do desempenho destas técnicas. Para mais detalhes destes algoritmos consultar: Morshedi et al. (1985), Pinto (1990), Kwong (1992), Souza (1993), Odlack (1994), Corrêa (1995), Ehirim (1995), Odlack (1996), Rodrigues (1996b).

Também deve ser comentado que quando se utiliza GM como variável manipulada, é possível reduzir a temperatura no segundo ponto de colocação e aumentar a temperatura no terceiro ponto de forma eficiente e segura. Já a variável manipulada R é boa somente para aumentar a temperatura no segundo ponto de colocação. Portanto, estes parâmetros só devem ser utilizados como variáveis manipuladas em pontos do reator em que eles conseguem influenciar os perfis axiais de temperatura. Tal comportamento limita em muito a utilização destes parâmetros para uma situação genérica de controle.

Portanto, devido as características do sistema e das potencialidades dos controladores utilizados, se mostra necessário a utilização de controladores avançados para o controle de reatores catalíticos de leito fixo para se obter um bom desempenho do mesmo frente as possíveis perturbações e mudanças operacionais desejadas. As figuras do controle monovariável do reator (VI.2 à VI.22) referentes as variáveis controladas e manipuladas de um específico caso de estudo foram colocadas uma na sequência da outra, além de um texto para cada figura, para facilitar a relação entre as figuras e, portanto, a compreensão dos resultados. Detalhes sobre os valores dos parâmetros de operação e projeto do reator utilizados consultar o Apêndice III.

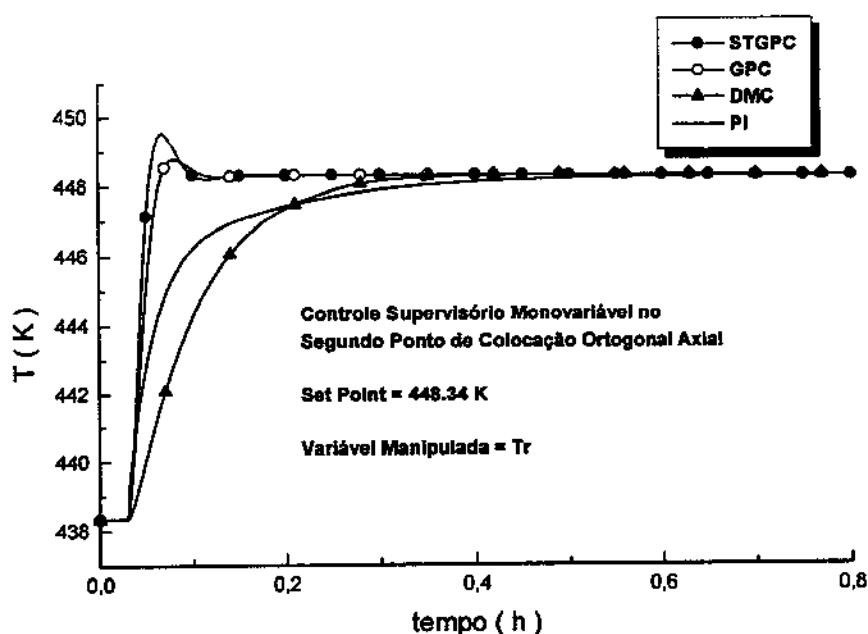


Figura VI.2 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

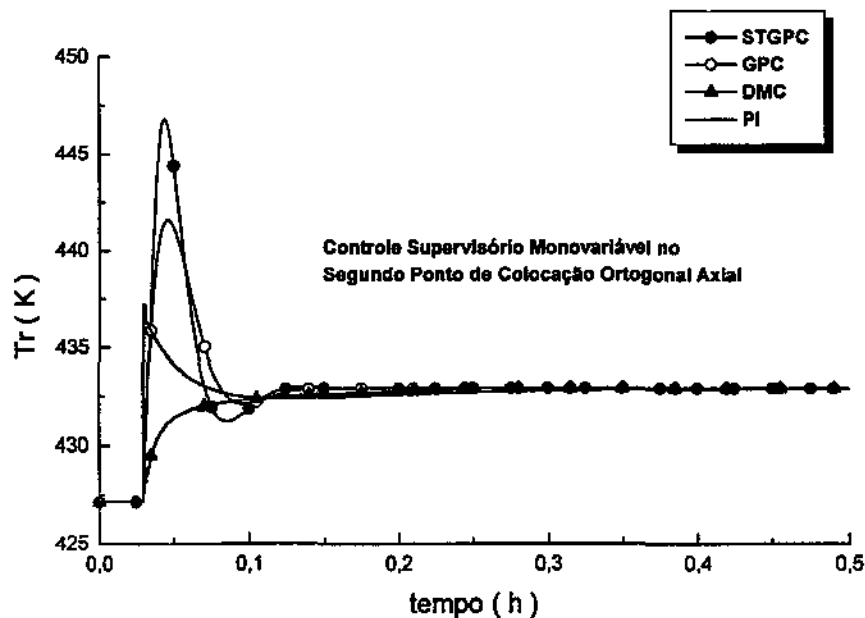


Figura VI.3 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

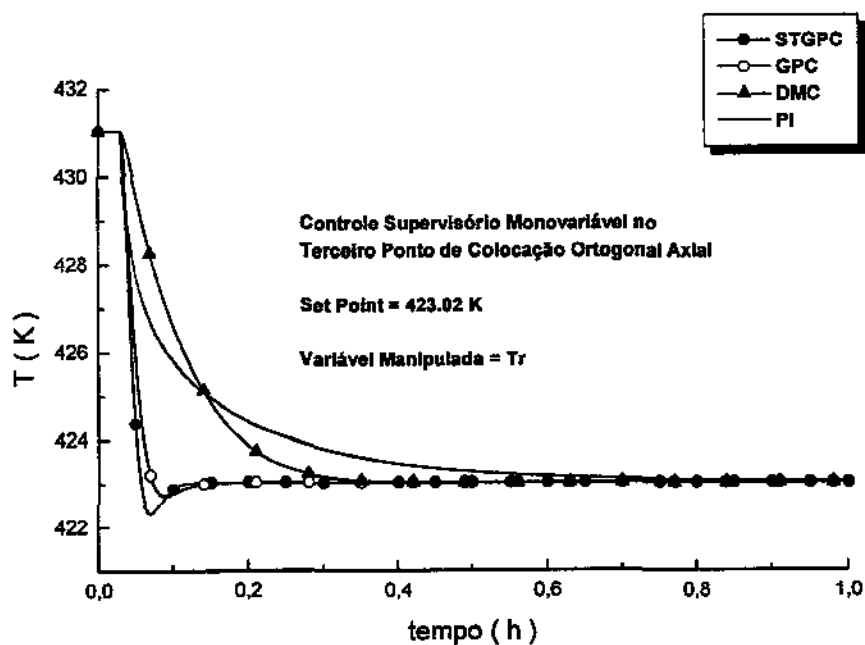


Figura VI.4 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

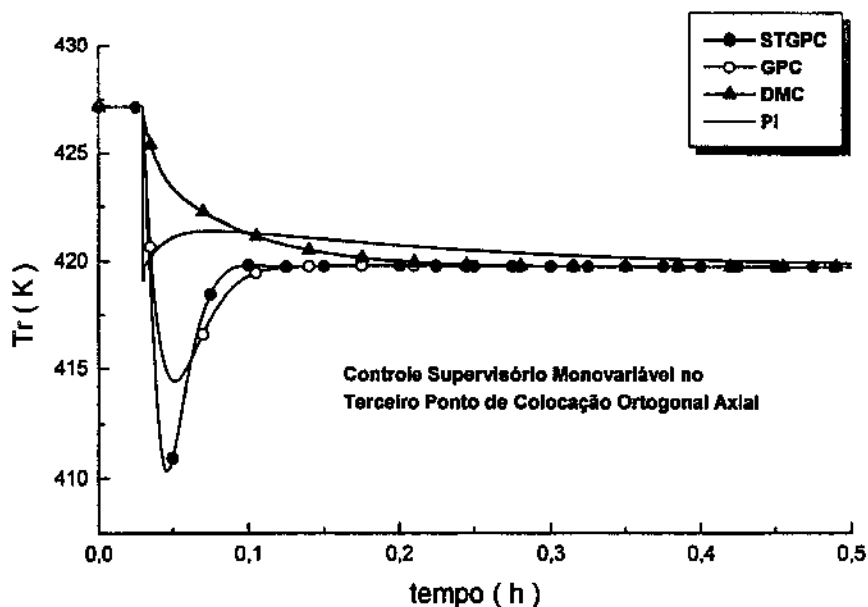


Figura VI.5 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

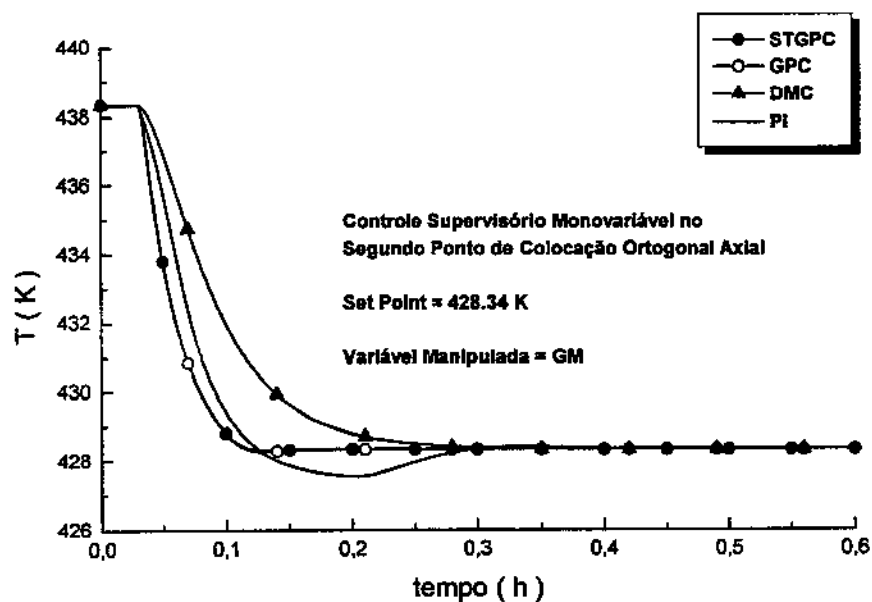


Figura VI.6 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

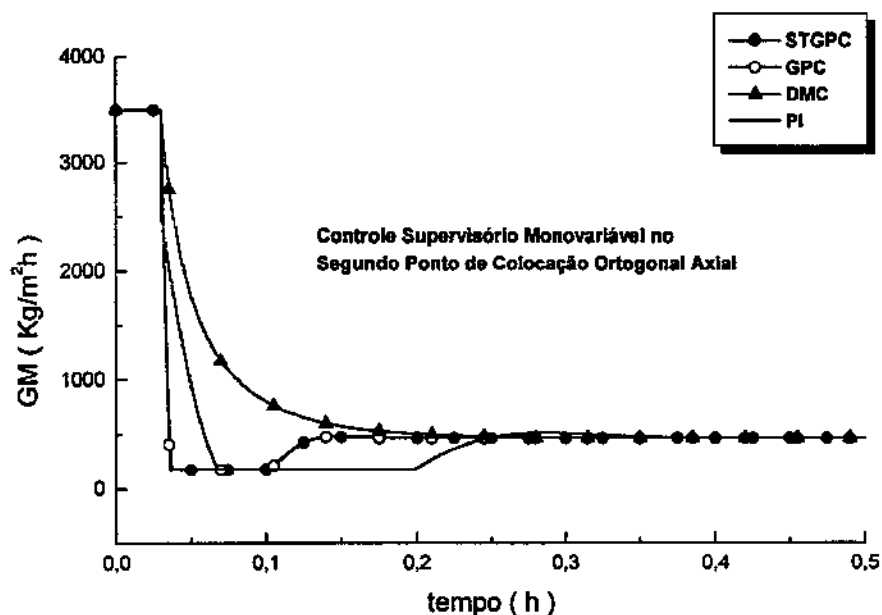


Figura VI.7 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

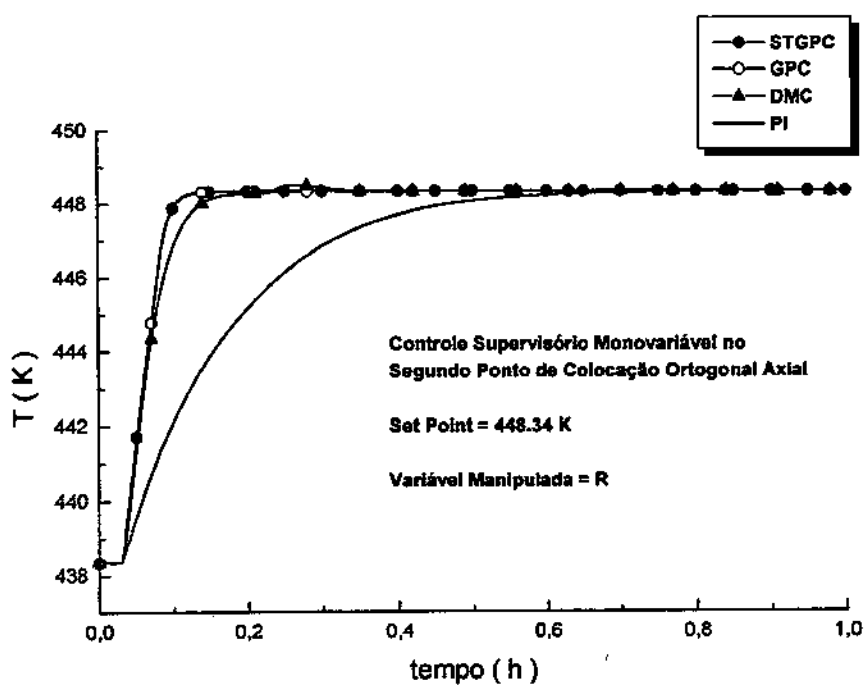


Figura VI.8 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

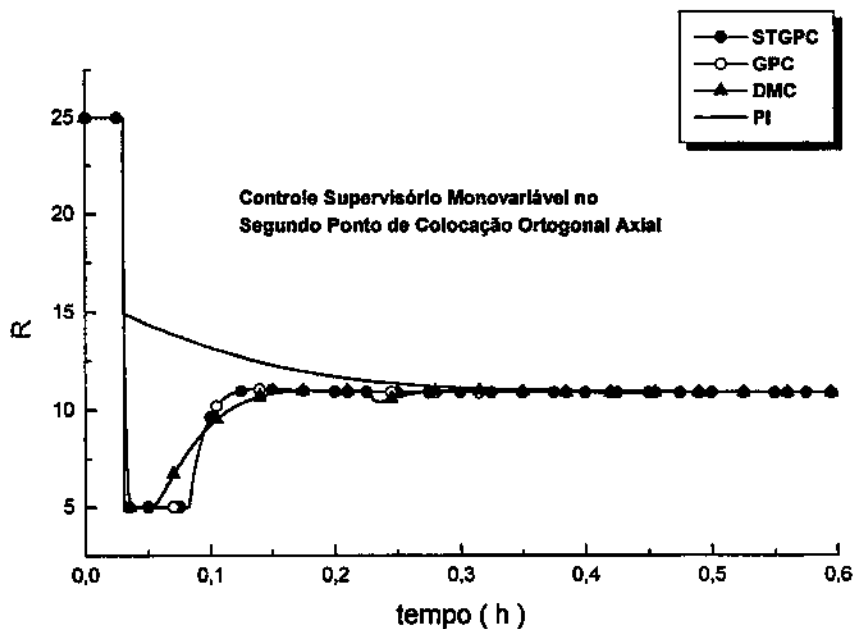


Figura VI.9 Variável Manipulada do Controle Supervisorio do Reator Catalítico de Leito Fixo

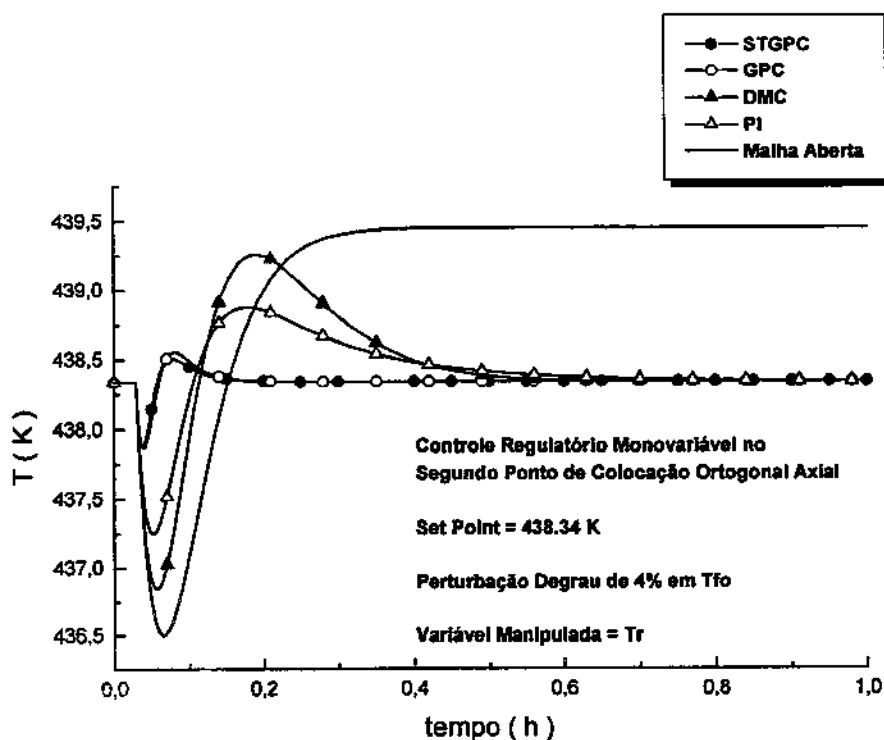


Figura VI.10 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

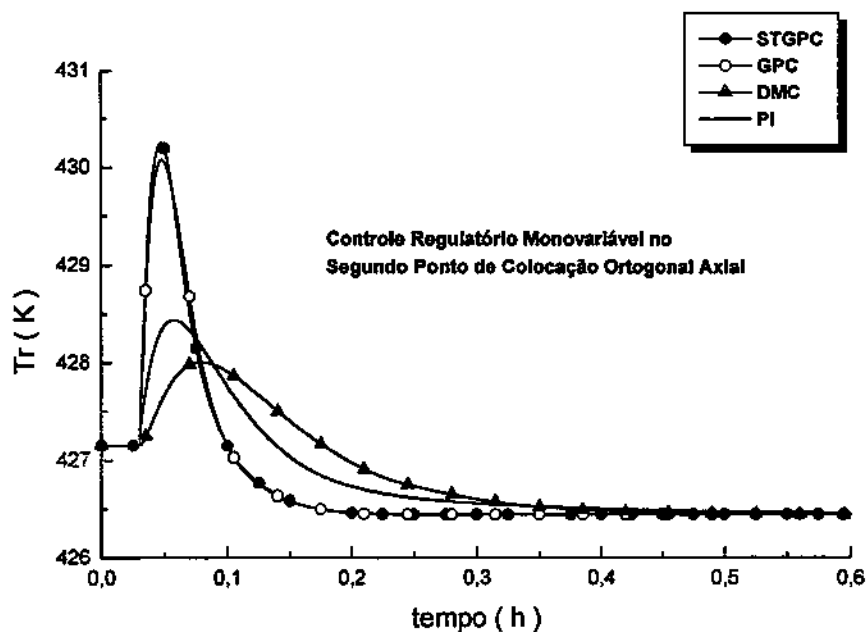


Figura VI.11 Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

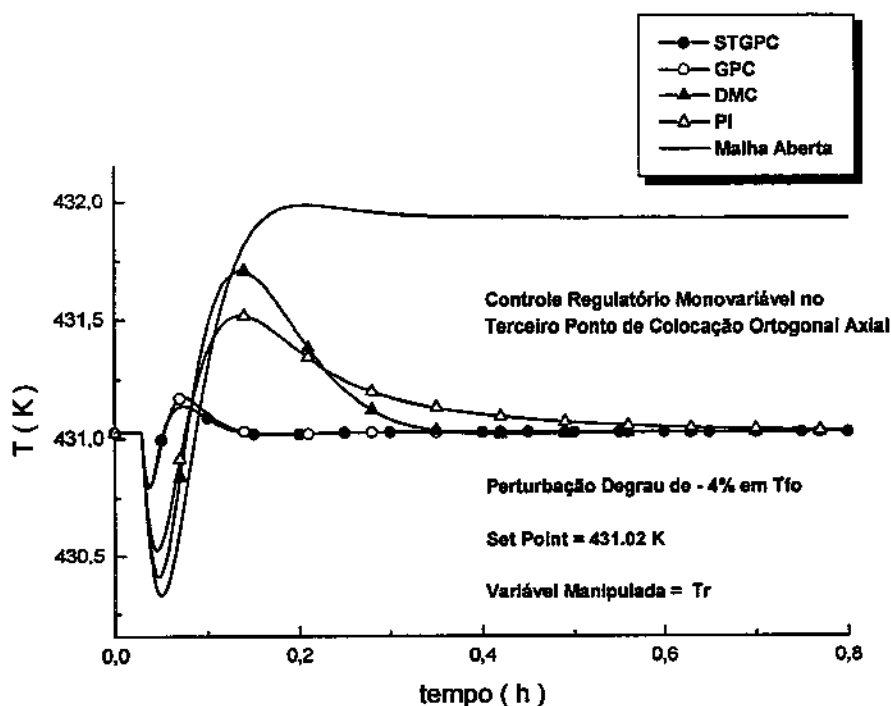


Figura VI.12 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

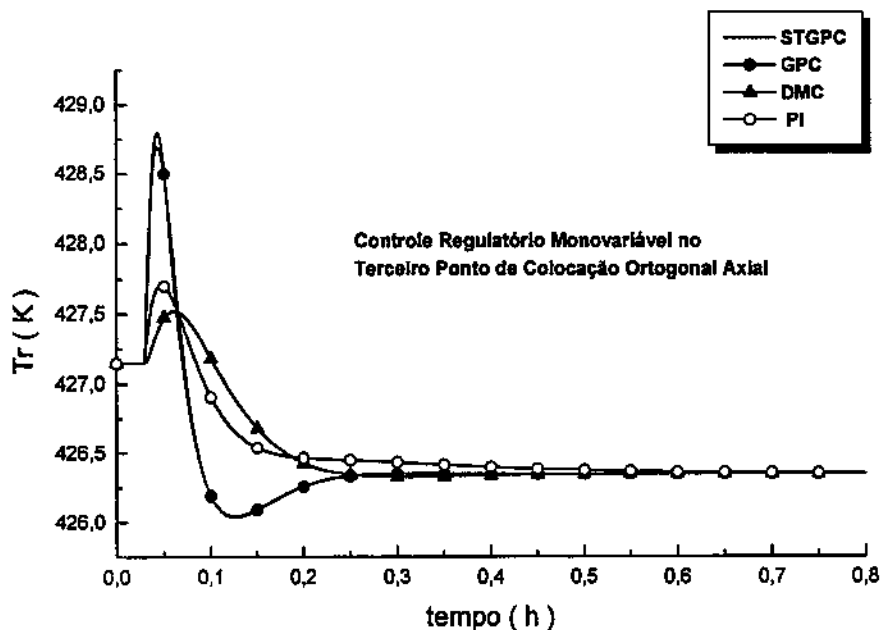


Figura VI.13 Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

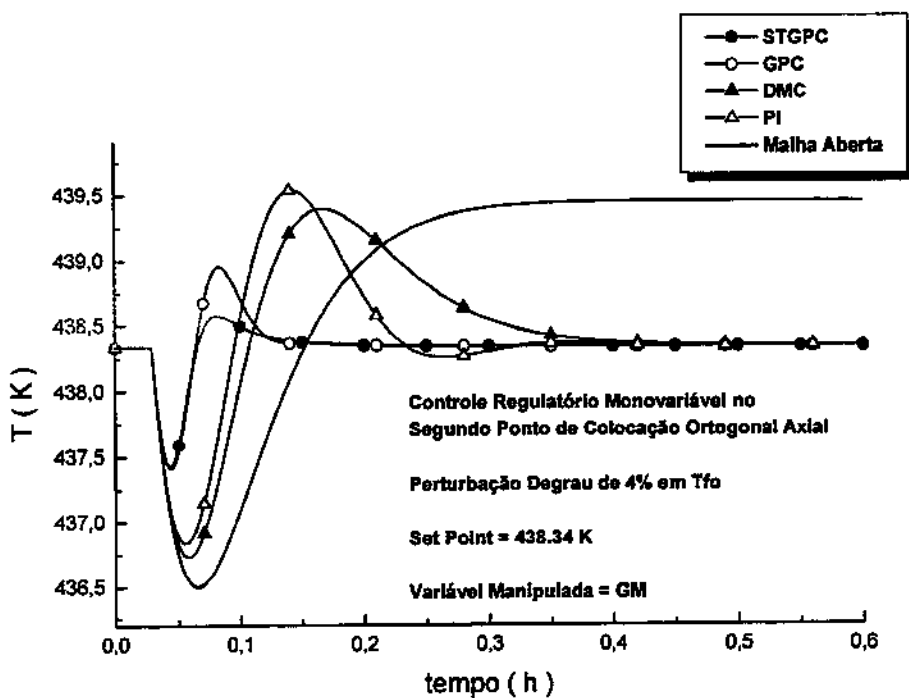


Figura VI.14 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo



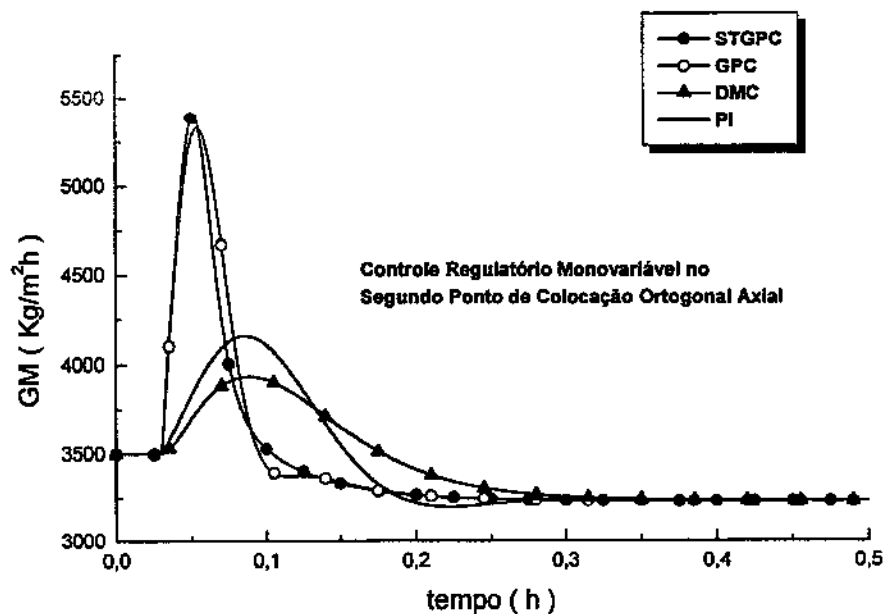


Figura VI.15 Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

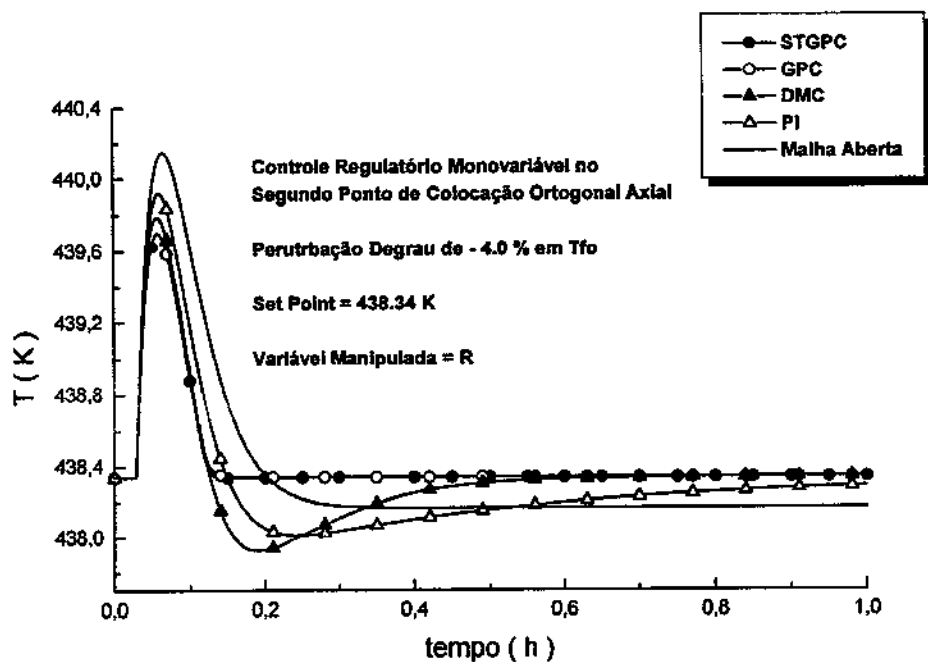


Figura VI.16 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

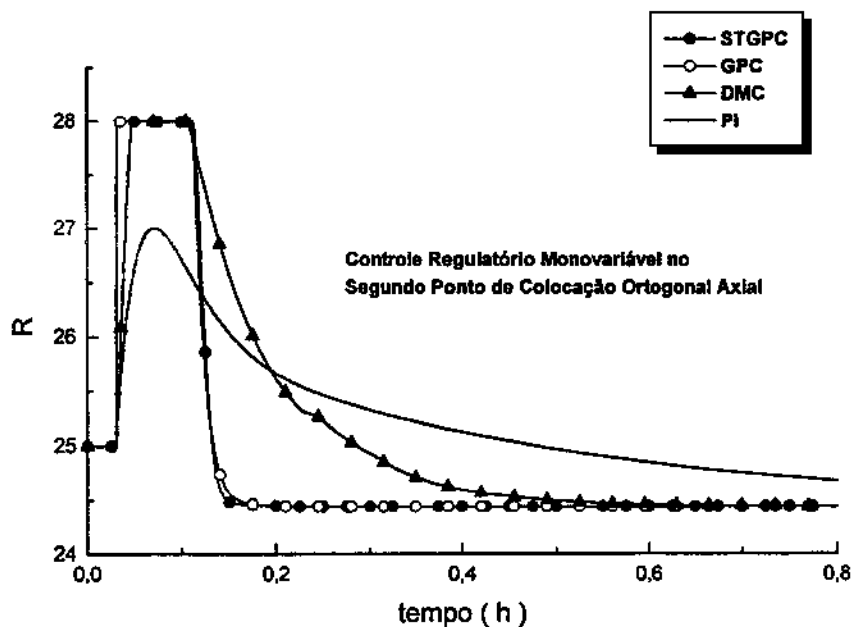


Figura VI.17 Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

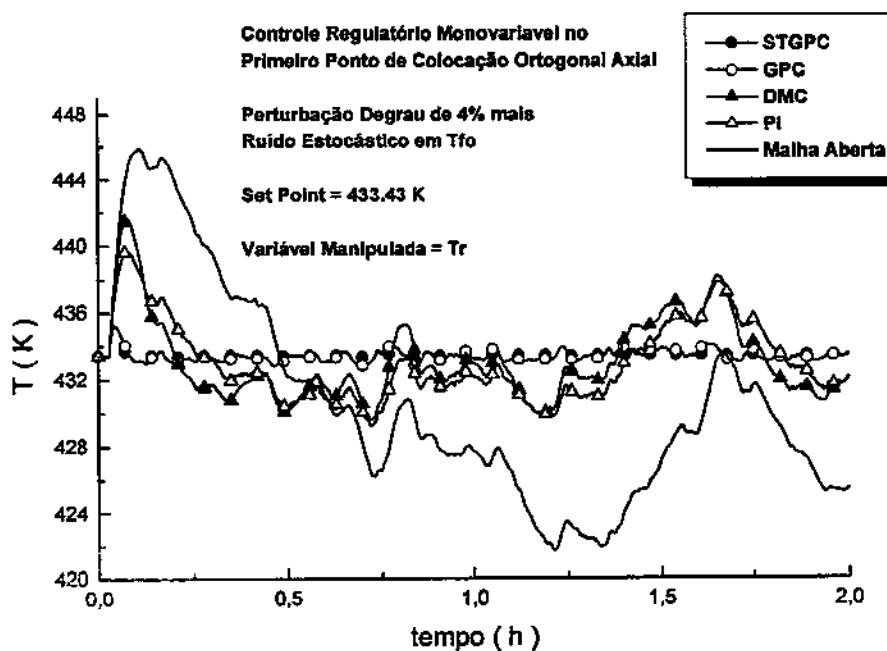


Figura VI.18 Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo

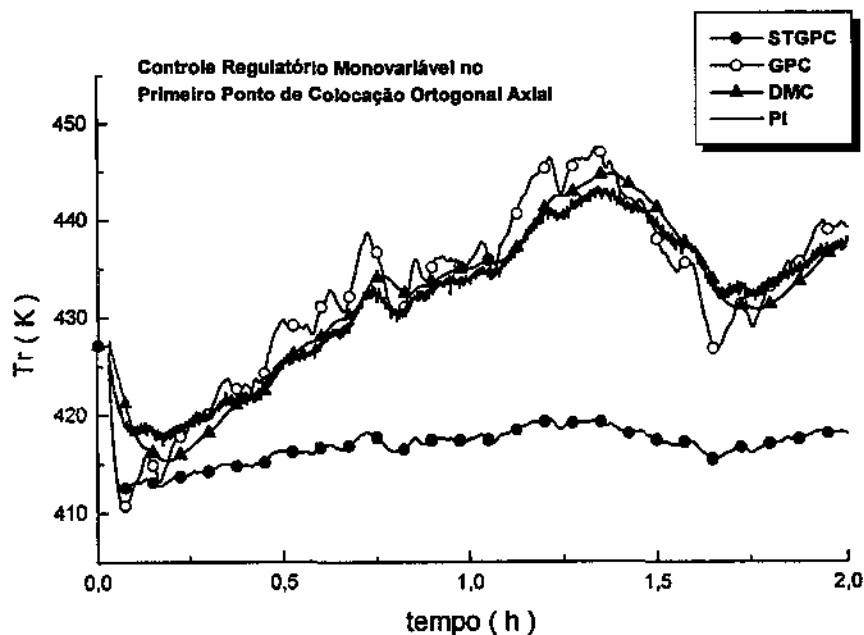


Figura VI.19 Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo

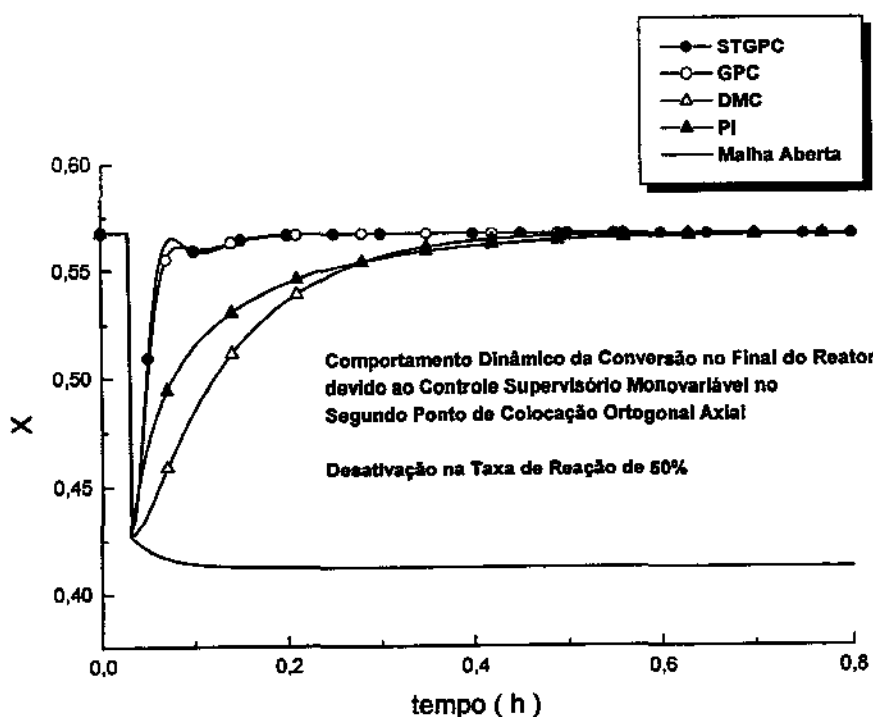


Figura VI.20 Comportamento Dinâmico no Final do Reator Catalítico de Leito Fixo

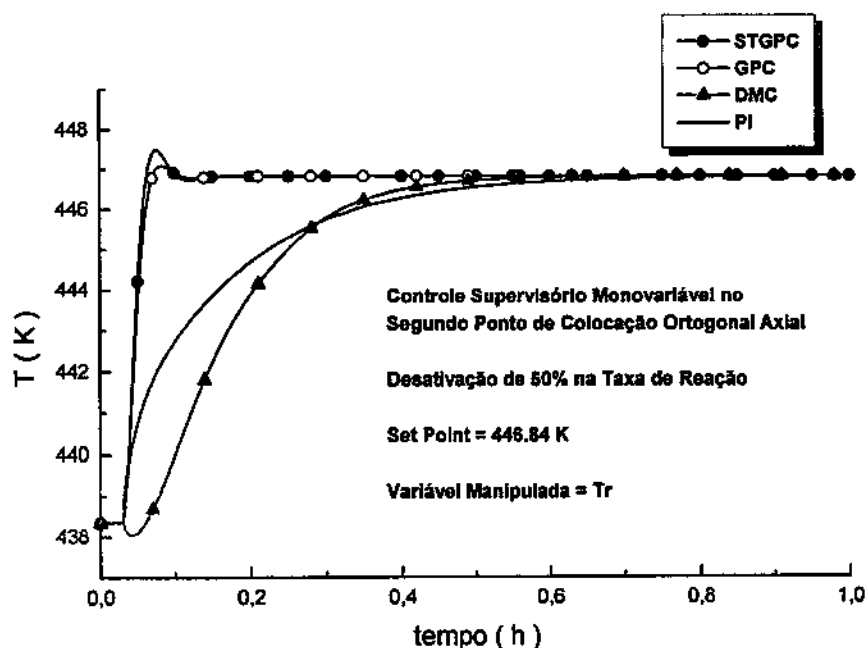


Figura VI.21 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

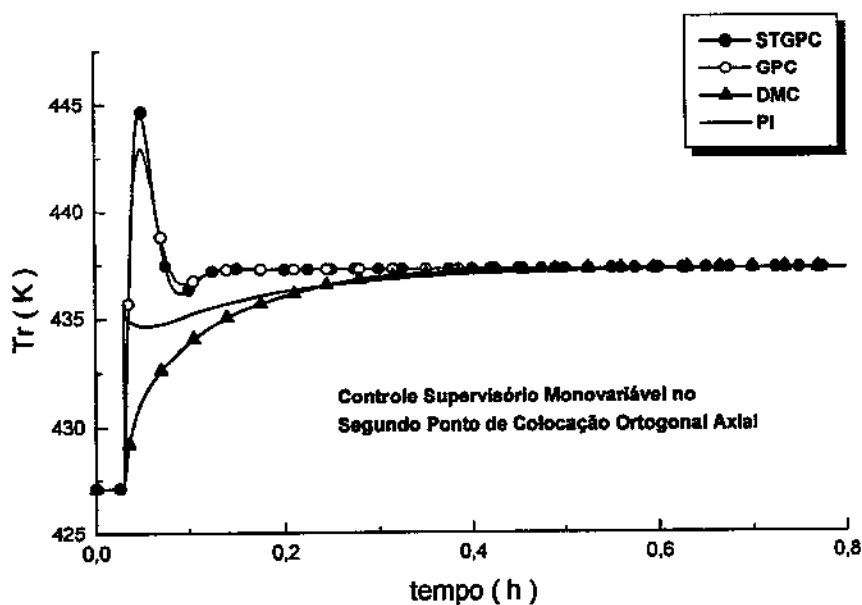


Figura VI.22 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

## VI.7 – Controle Multivariável - MIMO

As figuras apresentadas a seguir se referem a casos específicos do controle multivariável supervisor e regulatório do reator. Cada caso do controle do reator é apresentado por 4 figuras. As duas primeiras se referem as variáveis controladas e as duas seguintes as variáveis manipuladas. Cada figura contém as seguintes informações: tipo de controle, o “set point”, a variável manipulada, o ponto do reator controlado e os algoritmos de controle utilizados.

A seguir é apresentado um esquema para ajudar na identificação das figuras com os casos de controle estudados.

Variável Controlada	Variável Manipulada
Segundo Ponto de Colocação Axial	GM
Terceiro Ponto de Colocação Axial	Tr
Controle Supervisor Figuras VI.23 à VI.26 Figuras VI.27 à VI.30	
Controle Regulatório Figuras VI.31 à VI.34 Figuras VI.35 à VI.38 (+Ruído Estocástico)	

Tabela VI.1 - 1º Caso de Estudo de Controle Multivariável

Variável Controlada	Variável Manipulada
Segundo Ponto de Colocação Axial	Tr
Terceiro Ponto de Colocação Axial	GM
Controle Supervisor Figuras VI.45 à VI.48 Figuras VI.49 à VI.52	
Controle Regulatório Figuras VI.53 à VI.56 Figuras VI.57 à VI.60 (+Ruído Estocástico)	

Tabela VI.2 - 2º Caso de Estudo de Controle Multivariável

Variável Controlada	Variável Manipulada
Primeiro Ponto de Colocação Axial	GM
Segundo Ponto de Colocação Axial	Tr
Controle Supervisório Figuras VI.61 à VI.64 Figuras VI.65 à VI.69 (+Desativação da Taxa de Reação)	

Tabela VI.3 - 3º Caso de Estudo de Controle Multivariável

No caso multivariável as variáveis manipuladas escolhidas foram Tr e GM. R não foi utilizado por que só influência de maneira significativa o reator num único ponto axial e sentido, isto é, só permite aumentar a temperatura neste ponto do reator quando este é diminuído. Na situação inversa quase não afeta o comportamento do reator, com conclusões semelhantes ao do caso monovariável.

Com relação a variável GM, esta influencia o reator para diminuir a temperatura no segundo ponto de colocação axial e aumentá-la no terceiro ponto de colocação. É importante ressaltar que esta variável apresenta ganho muito baixo, como já comentado anteriormente, o que a torna uma variável manipulada não ideal para o controle do reator dentro das condições estudadas. Esta variável foi a única opção disponível dos parâmetros operacionais do reator além da temperatura de refrigeração, Tr, para a implementação da malha multivariável.

Já a temperatura do fluido refrigerante, Tr, influencia significativamente todos os pontos do reator, tem um ganho alto e proporciona respostas dinâmicas das temperaturas axiais de primeira ordem. Trata-se portanto de um parâmetro adequado para ser utilizado como variável manipulada, embora seja necessário um projeto mecânico adequado que possibilite mudanças rápidas no valor de Tr. Consideração neste ponto também deve ser dada para o próprio projeto do fluido refrigerante como sugerido por McGreavy e Maciel Filho, 1988.

Com relação ao controle multivariável, observou-se para a situação específica (modelo do reator e condições de operação/projeto) que a utilização de duas malhas SISO se comportaram melhor do que uma malha MIMO. Esta situação é representada nas Figuras VI.39 à VI.44. As demais figuras foram geradas só utilizando duas malhas SISO.

No entanto, quando utilizou-se um modelo unidimensional para representar o reator, a malha MIMO se comportou bem. Para mais detalhes da

modelagem e controle deste modelo unidimensional consultar: Toledo e Maciel Filho (1996d, 1997a, 1997b, 1997c, 1997d, 1998b) e Toledo (1997). Neste caso, do modelo unidimensional, o ganho de GM era maior do que o do modelo aqui estudado, e GM influenciava bem o segundo e terceiro pontos de colocação axial, tanto para aumentar como para abaixar a temperatura do reator. Portanto, todos estes fatores conjuntamente com as dificuldades e erros associados com a identificação do modelo interno podem ser prováveis causas do melhor desempenho das duas malhas SISO, e mostram a importância dos trabalhos de simulação na discriminação de modelos e estratégias de controle. Outra questão que deve ser comentada (embora tenha sido obtida após a realização deste trabalho) é que o controle multivariável, MIMO, apresentou bons resultados superando as dificuldades comentadas anteriormente e apresentadas a seguir. O artifício utilizado foi a inicialização dos parâmetros do modelo interno por valores próximos dos parâmetros das malhas monovariáveis. No entanto, as conclusões gerais sobre as dificuldades enfrentadas e o desempenho dos controladores permaneceram as mesmas das apresentadas neste tópico. Mais detalhes consultar Toledo e Maciel Filho (1999c).

O casos de controle estudados mostram um bom desempenho dos controladores avançados, principalmente o GPC e STGPC, conclusões semelhantes ao do caso monovariável. Também pode-se observar que o 3º caso de estudo foi o que proporcionou piores resultados. Isto pode ser explicado pelo fato de que o parâmetro GM quando reduzido no seu valor de operação até cerca de 50% aumenta a temperatura do reator. Para porcentagens de redução superiores, a temperatura do reator abaixa. Esta característica dinâmica do primeiro ponto de colocação axial não é prevista pelo modelo interno do controlador e pela própria relação variável controlada/manipulada, o que pode gerar instabilidade no controle do reator.

Portanto, observando as figuras a seguir, conclui-se que no caso multivariável é melhor controlar o segundo e terceiro pontos de colocação axial do reator, variando conforme a situação a configuração variável controlada/manipulada para se obter o melhor desempenho do controlador, utilizando a favor do controlador as características dinâmicas do reator.

Outras questões importantes observadas são as variações das variáveis manipuladas. A variável manipulada  $Tr$  não apresentou grandes variações, no entanto, houve mudanças bruscas provocadas pelos controladores, principalmente pelo GPC e STGPC. Esta condição pode ser proibitiva na prática, necessitando-se utilizar parâmetros mais conservativos para estes controladores. Por ter um ganho baixo, GM sofre forte variações em relação

ao seu valor operacional padrão, chegando inclusive a saturar o seu valor nos limites operacionais. Nem todas as situações de controle estudadas obtiveram sucesso; as vezes quando o valor de GM atinge o limite estabelecido, a variável fica saturada e o controle impossibilitado. Portanto, algoritmos de controle incorporando restrições operacionais na sua formulação matemática devem ser implementados e ter o seu desempenho no controle do reator catalítico de leito fixo cuidadosamente avaliados antes de serem propostos como soluções definitivas.

Todas estas questões, principalmente em se tratando de reatores de leito fixo são esperadas. Estes problemas são decorrentes das não-linearidades e a natureza distribuída do sistema, reações altamente exotérmicas, grande acoplamento entre as variáveis manipuladas e controladas, limitações físicas e do comportamento das variáveis manipuladas, etc.

Detalhes dos parâmetros de operação e projeto do reator utilizados consultar o Apêndice III, e sobre o controle do reator estudado consultar as seguintes referências: Toledo (1997), Toledo e Maciel Filho(1996d, 1997a, 1997b, 1997c, 1997d, 1998a, 1998b, 1998d, 1999a, 1999c)

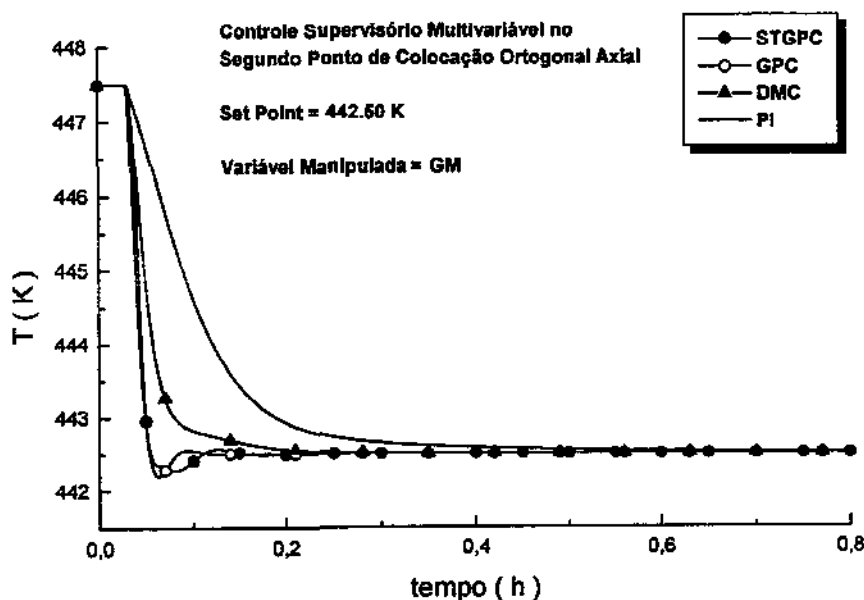


Figura VI.23 Controle Supervisorio do Reator Catalítico de Leito Fixo



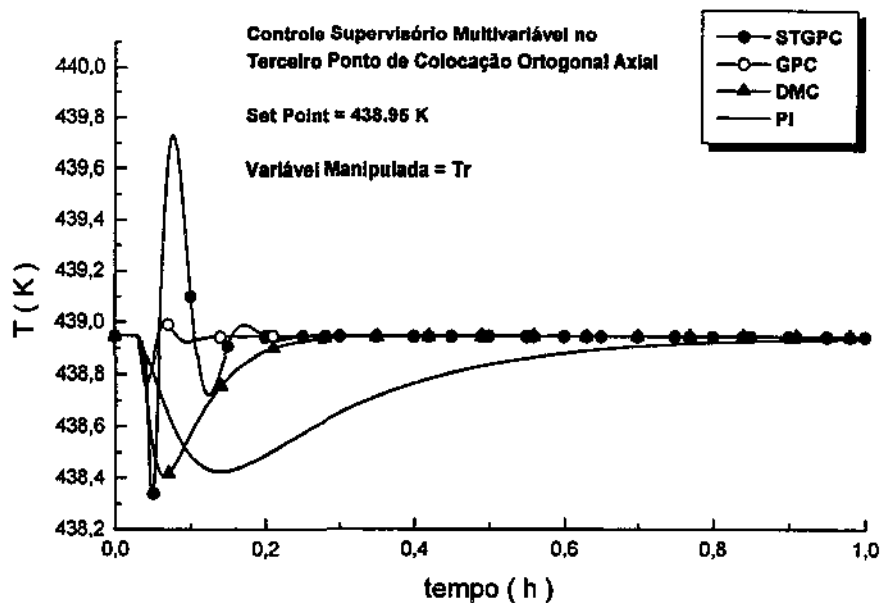


Figura VI.24 Controle Supervisorio do Reator Catalitico de Leito Fixo

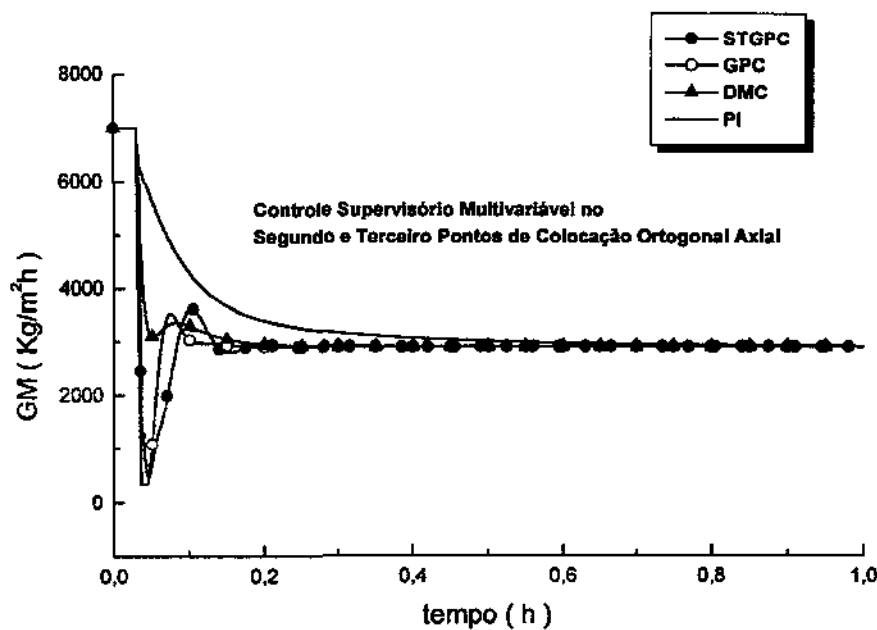


Figura VI.25 Variavel Manipulada do Controle Supervisorio do Reator Catalitico de Leito Fixo

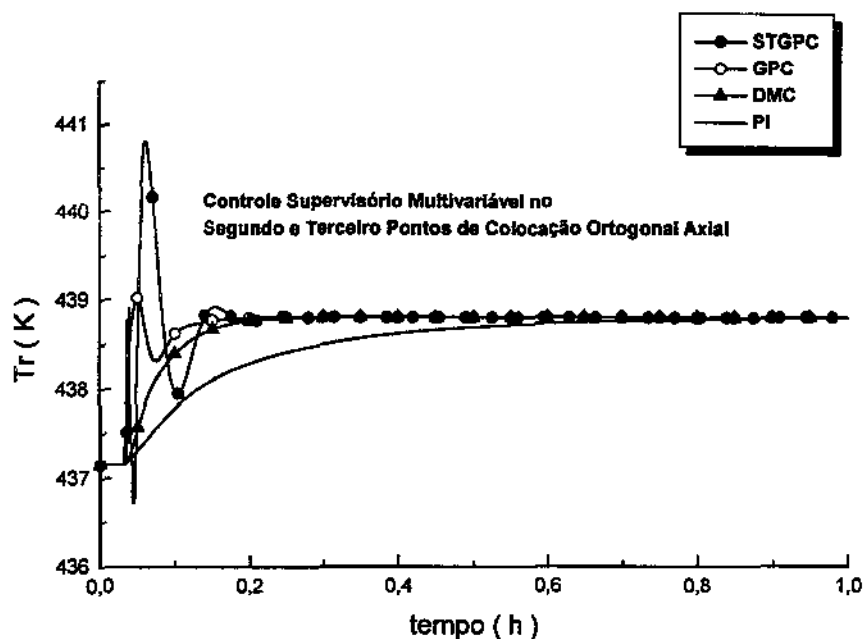


Figura VI.26 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

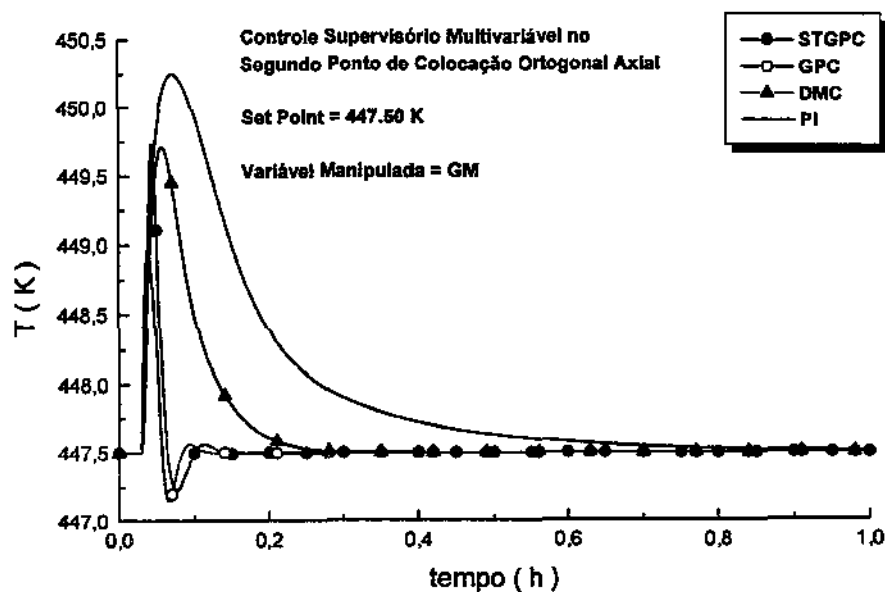


Figura VI.27 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

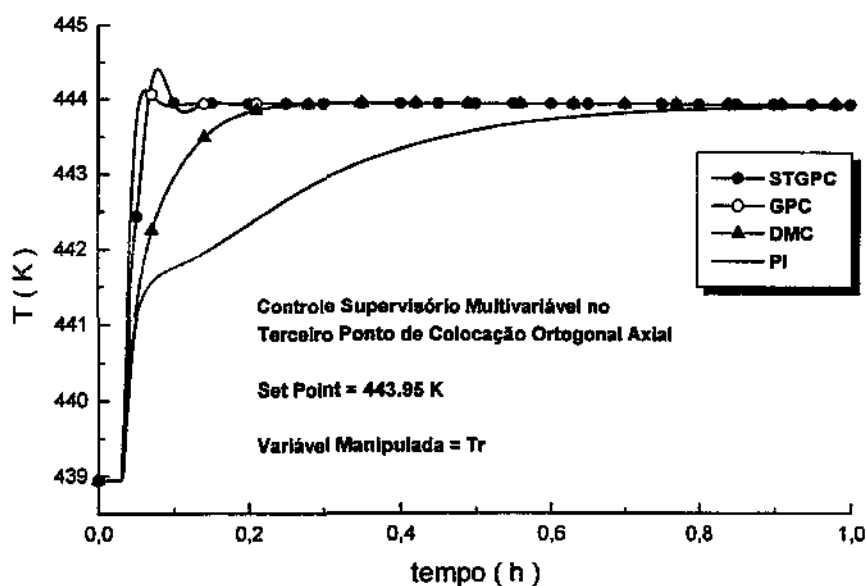


Figura VI.28 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

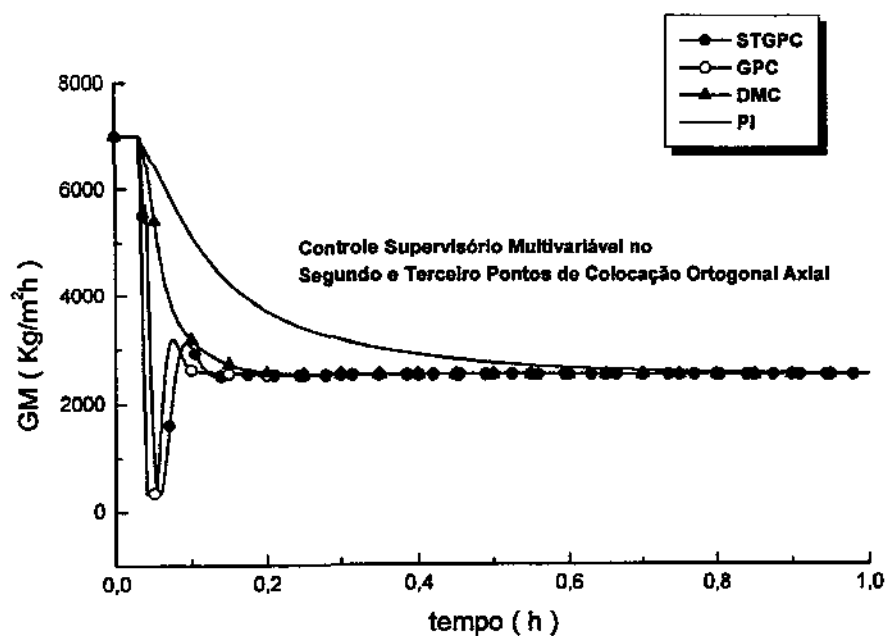


Figura VI.29 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

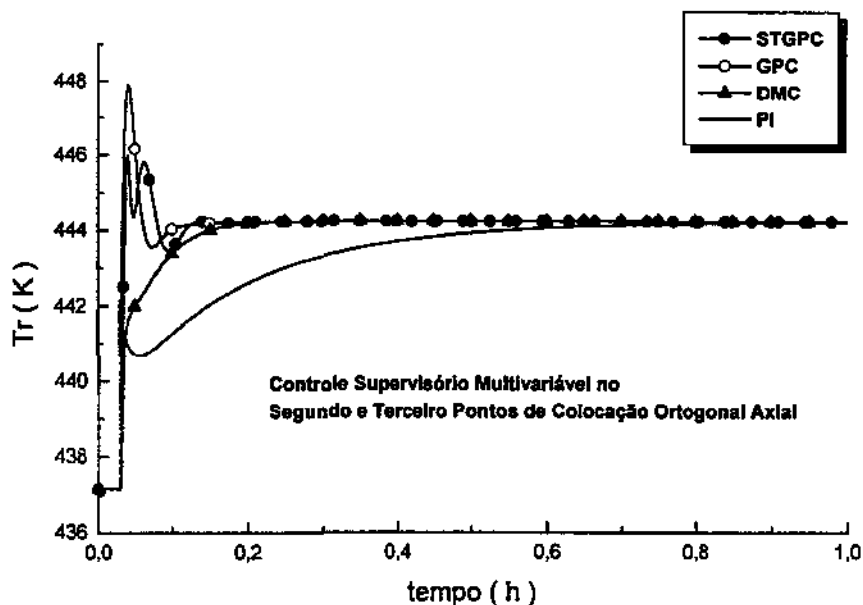


Figura VI.30 Variável Manipulada do Controle Supervisorio do Reator Catalítico de Leito Fixo

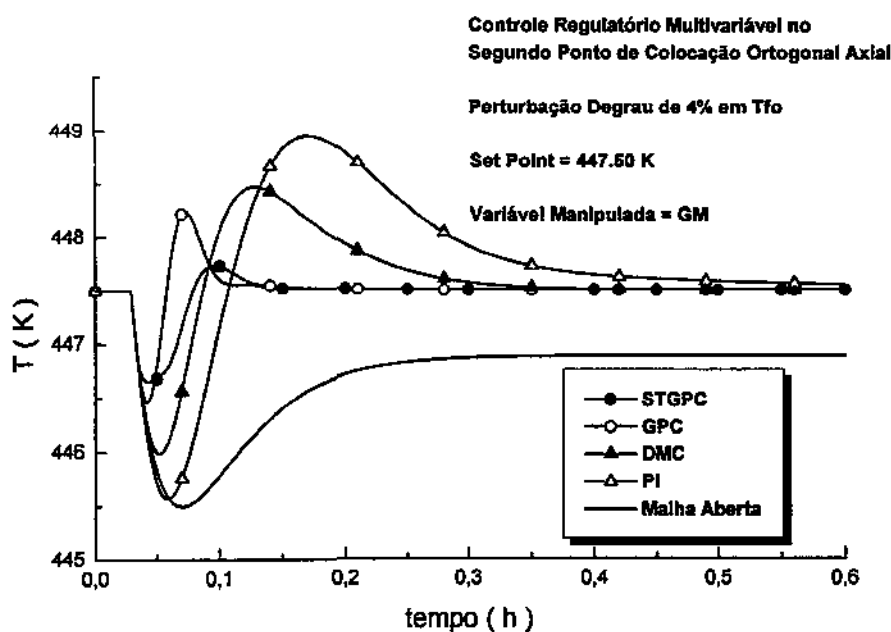


Figura VI.31 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

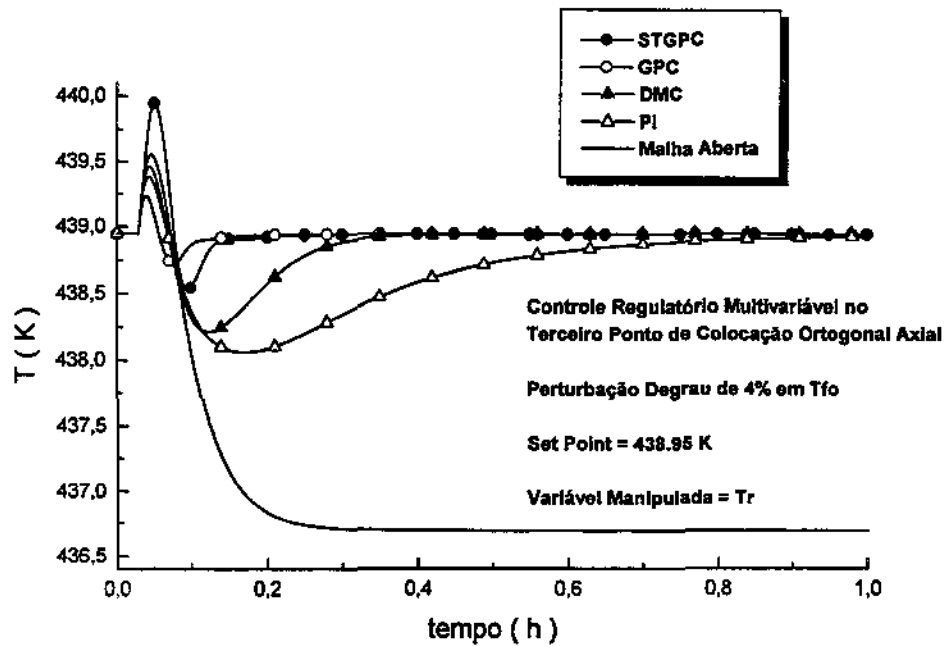


Figura VI.32 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

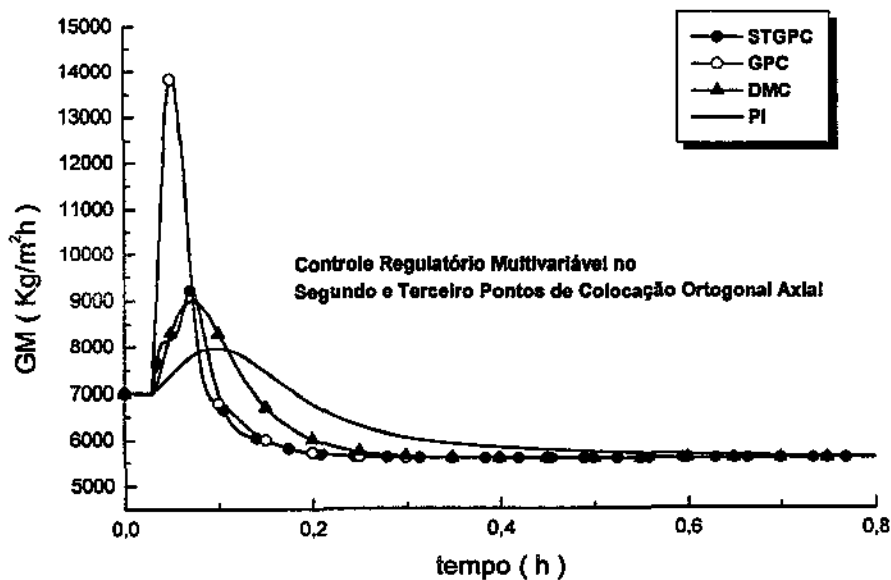


Figura VI.33 Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

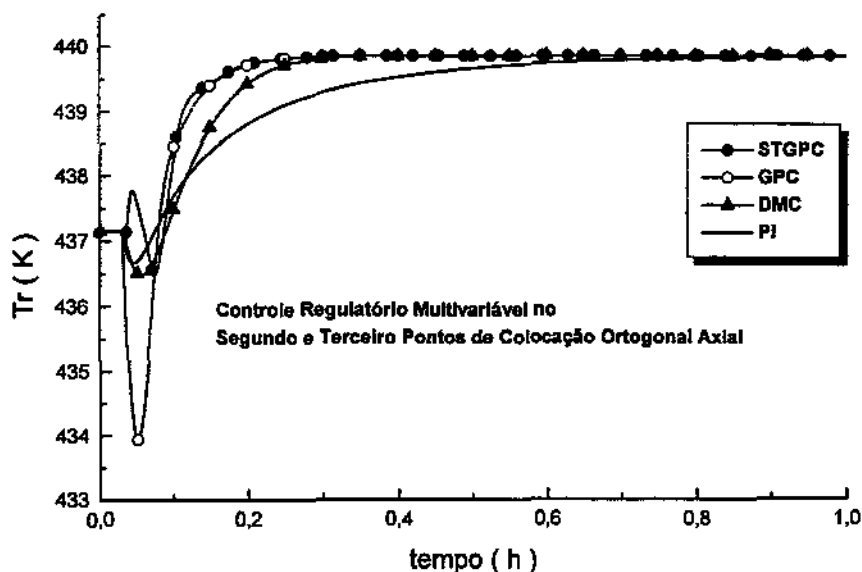


Figura VI.34 Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

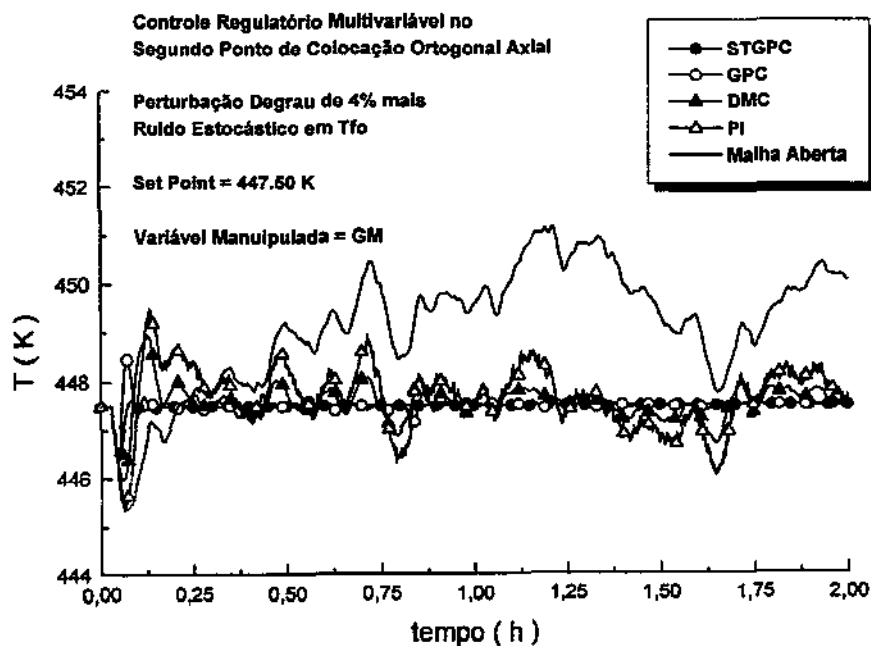


Figura VI.35 Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo

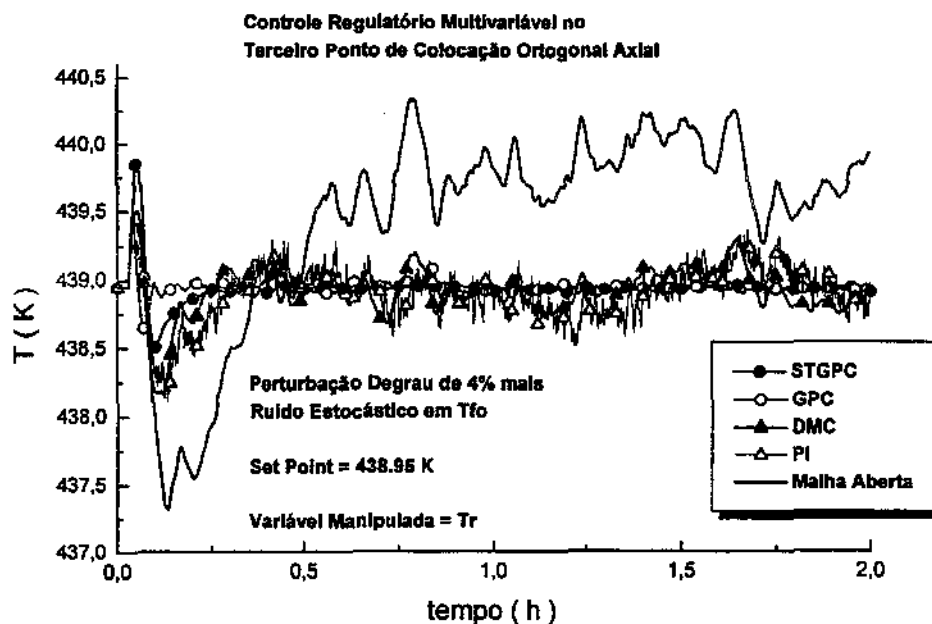


Figura VI.36 Controle Regulatório/Estocástico do  
Reator Catalítico de Leito Fixo

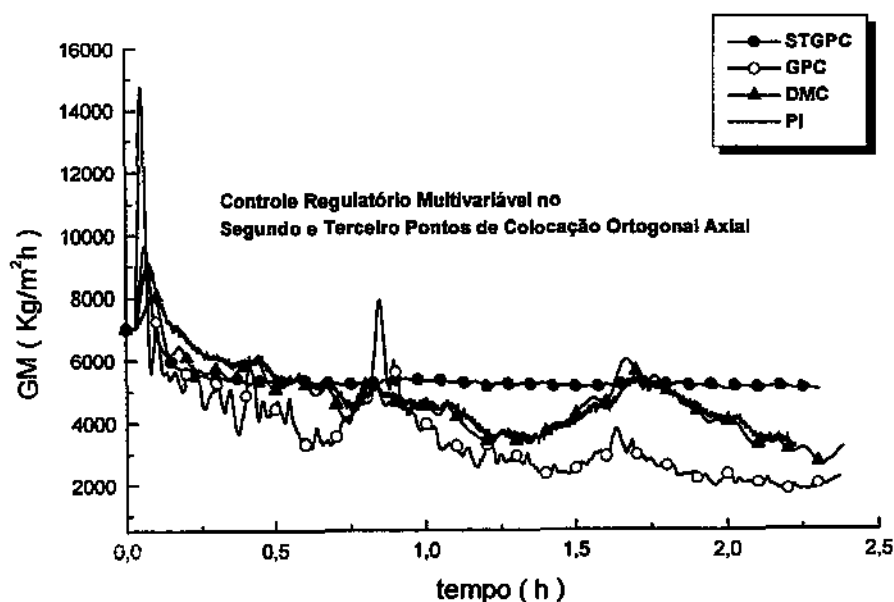


Figura VI.37 Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do  
Reator Catalítico de Leito Fixo

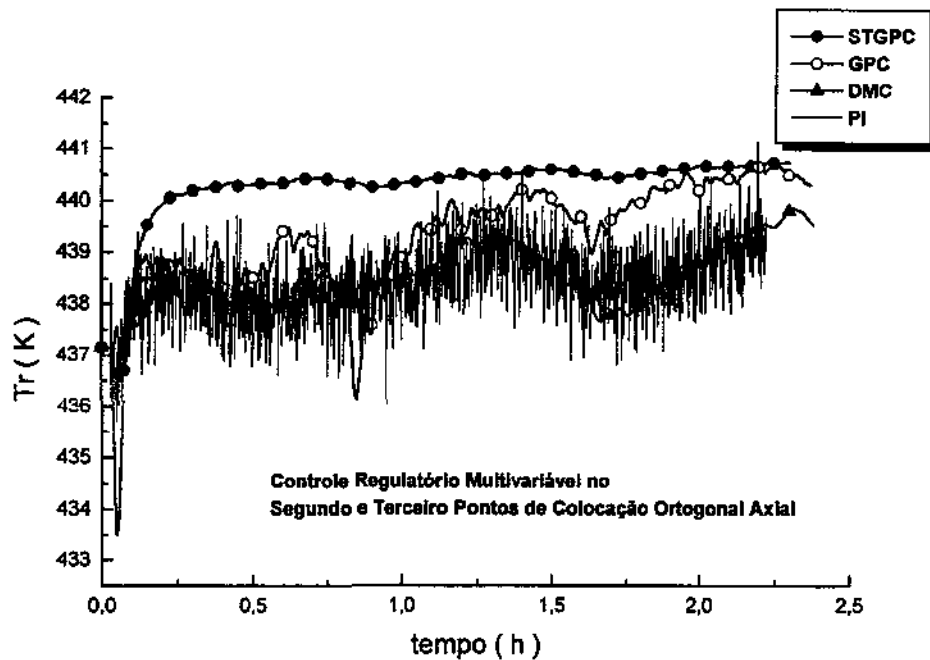


Figura VI.38 Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo

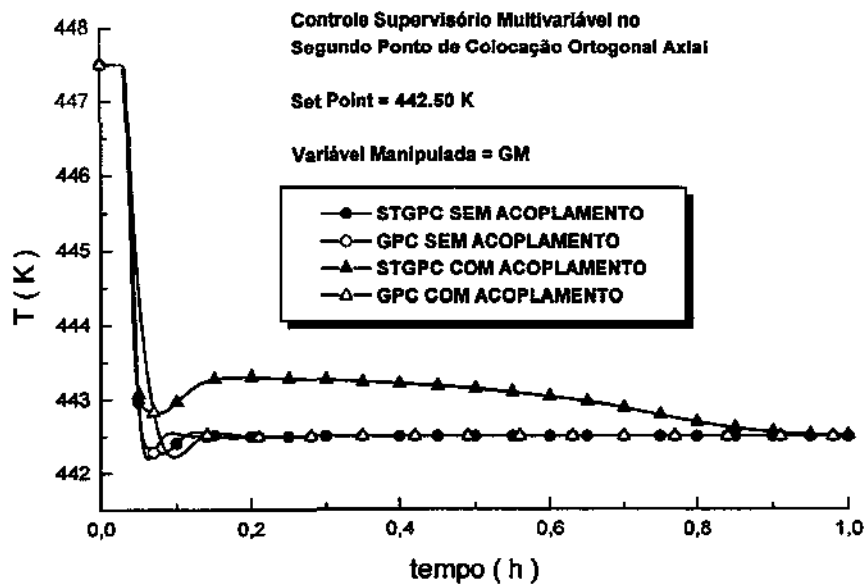


Figura VI.39 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo



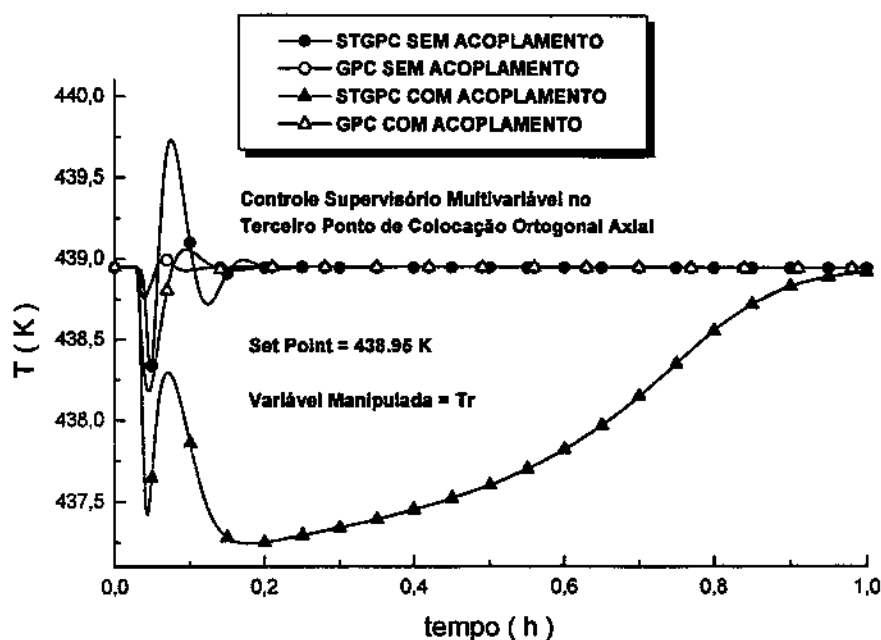


Figura VI.40 Controle Supervisorio do Reator Catalítico de Leito Fixo

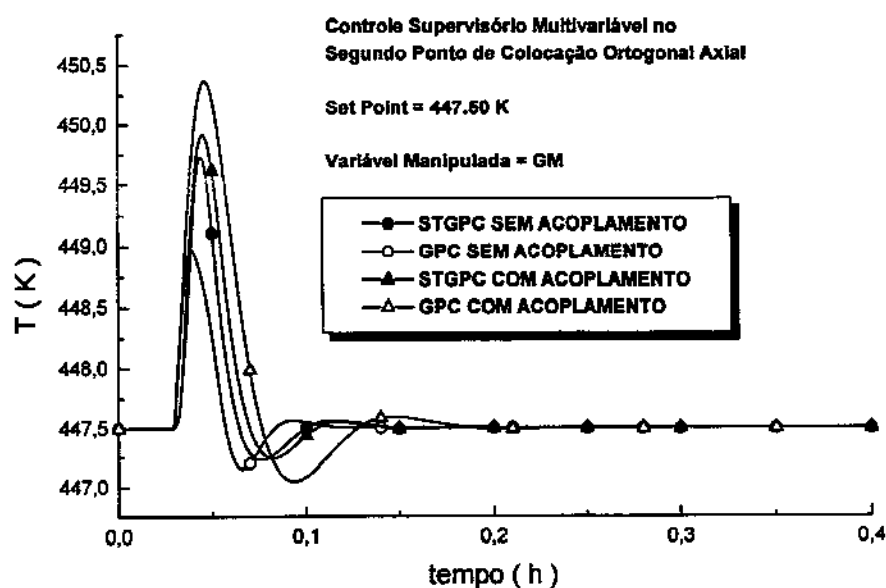


Figura VI.41 Controle Supervisorio do Reator Catalítico de Leito Fixo

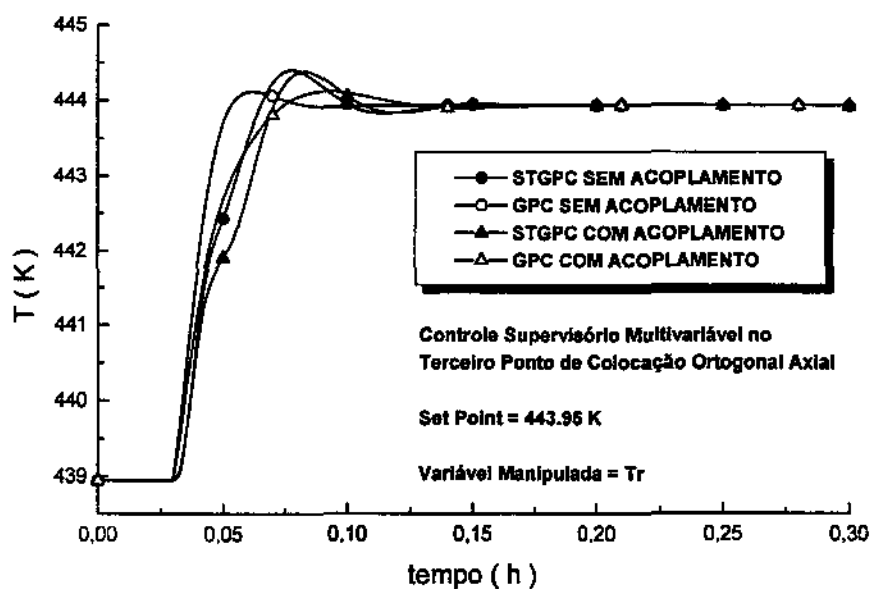


Figura VI.42 Controle Supervisorio do Reator Catalítico de Leito Fixo

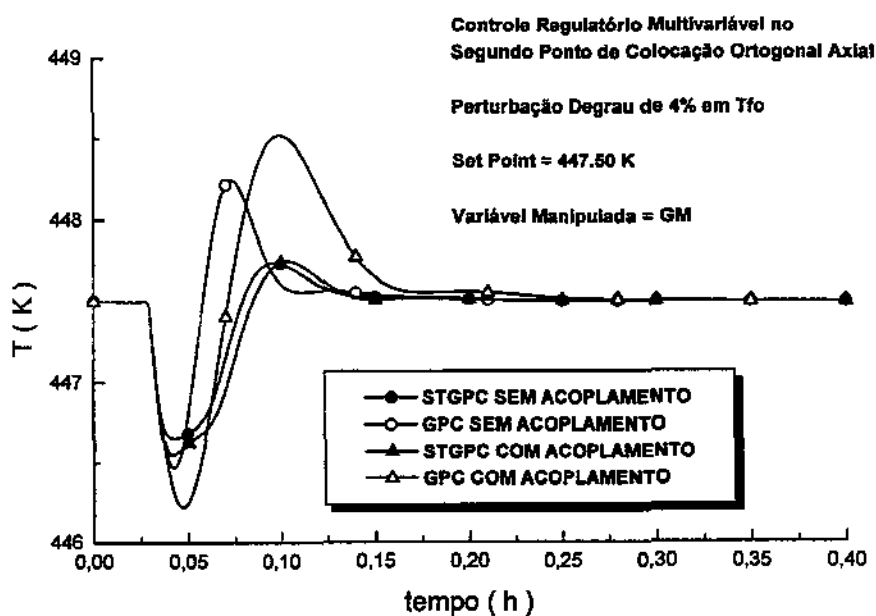


Figura VI.43 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

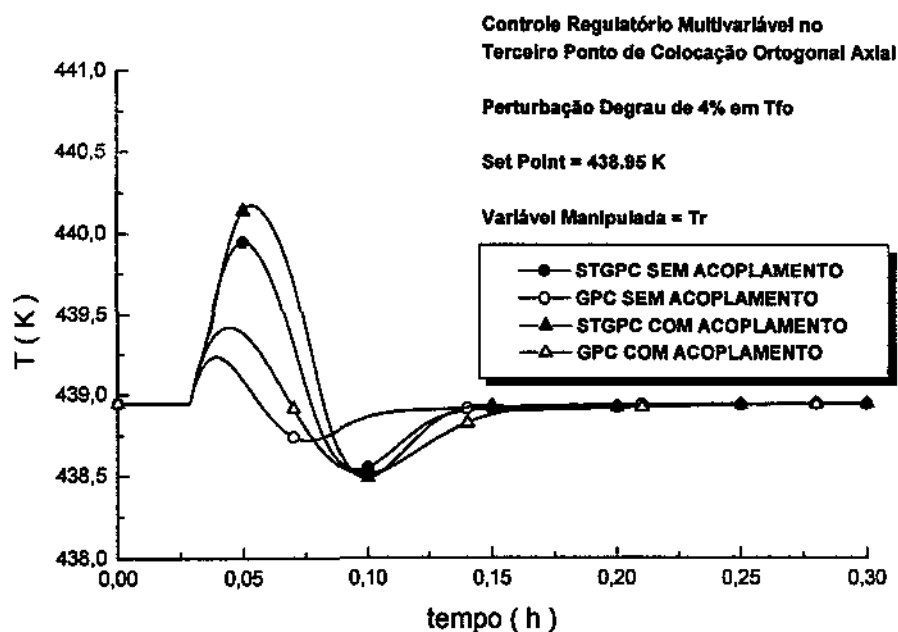


Figura VI.44 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

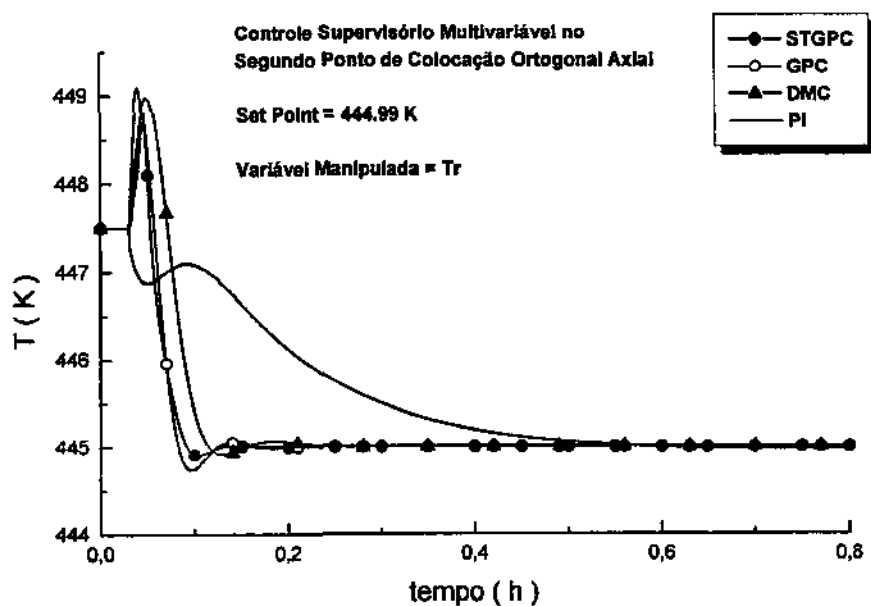


Figura VI.45 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

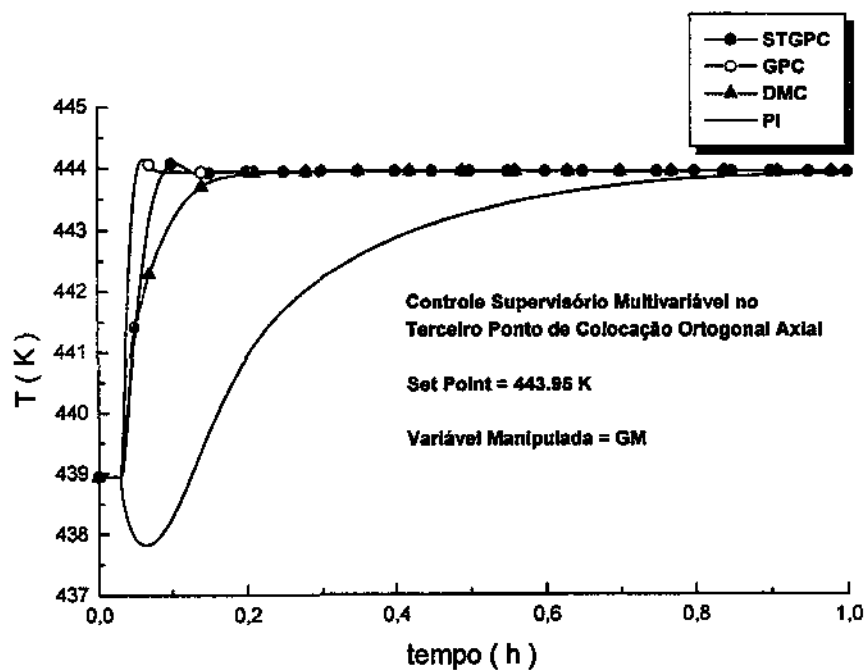


Figura VI.46 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

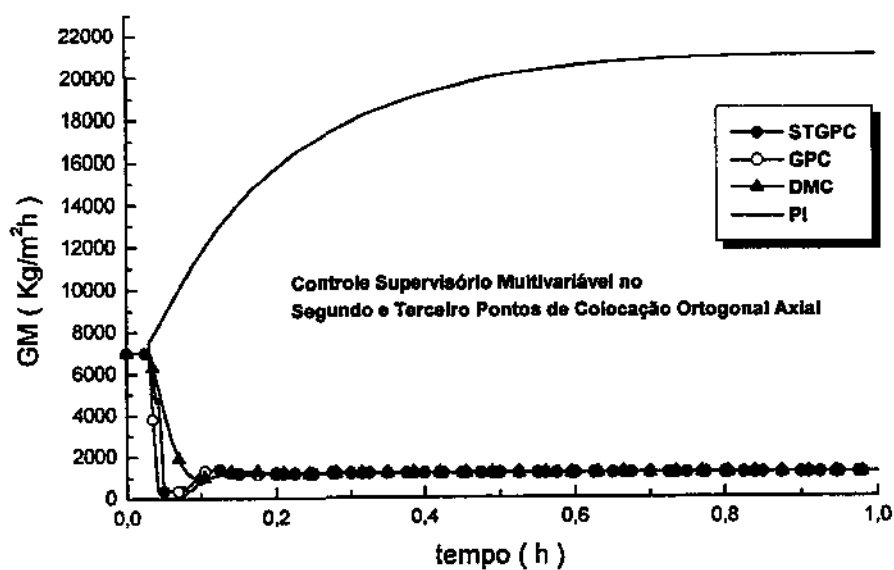


Figura VI.47 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

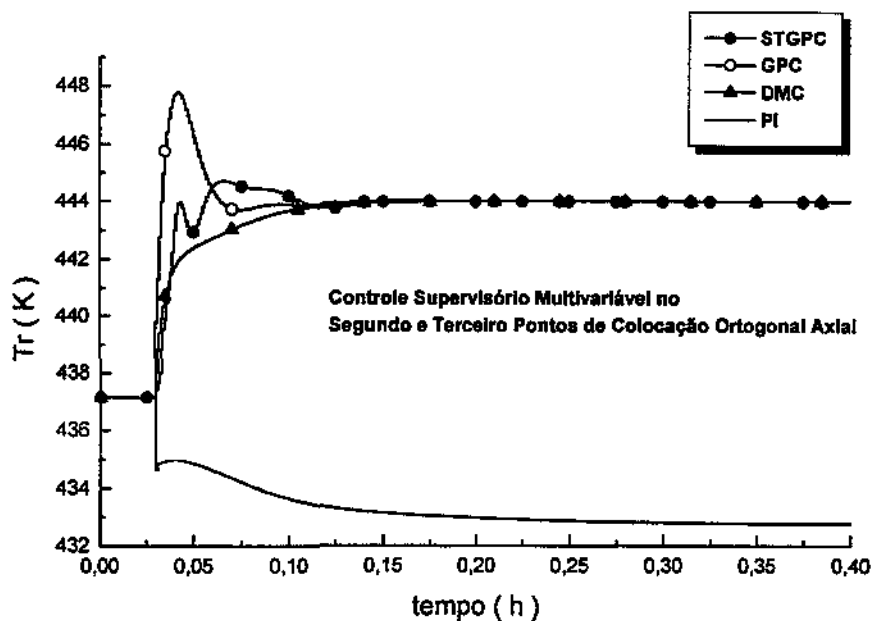


Figura VI.48 Variável Manipulada do Controle Supervisor do Reator Catalítico de Leito Fixo

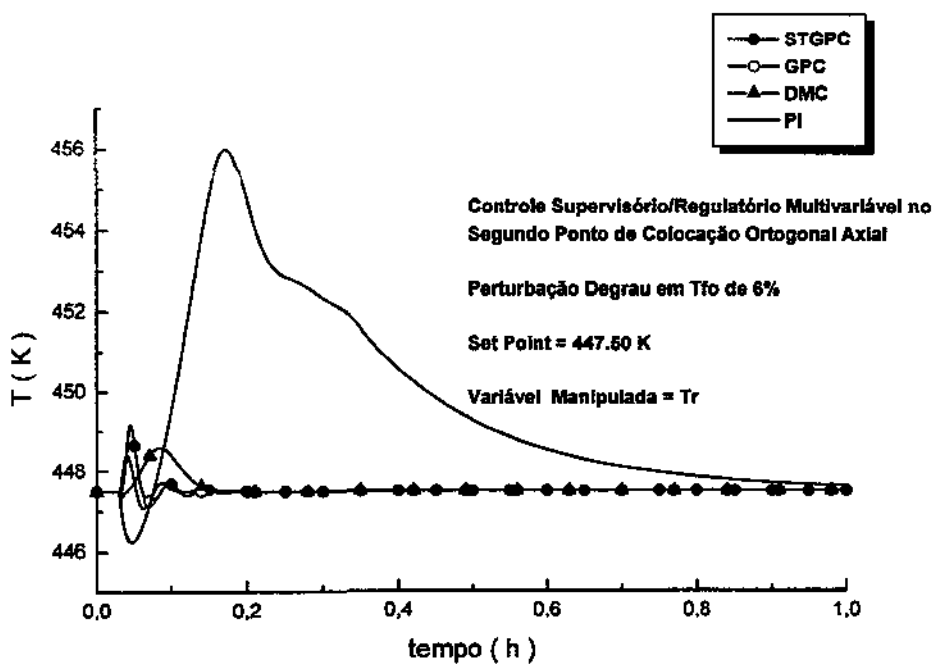


Figura VI.49 Controle Supervisor/Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

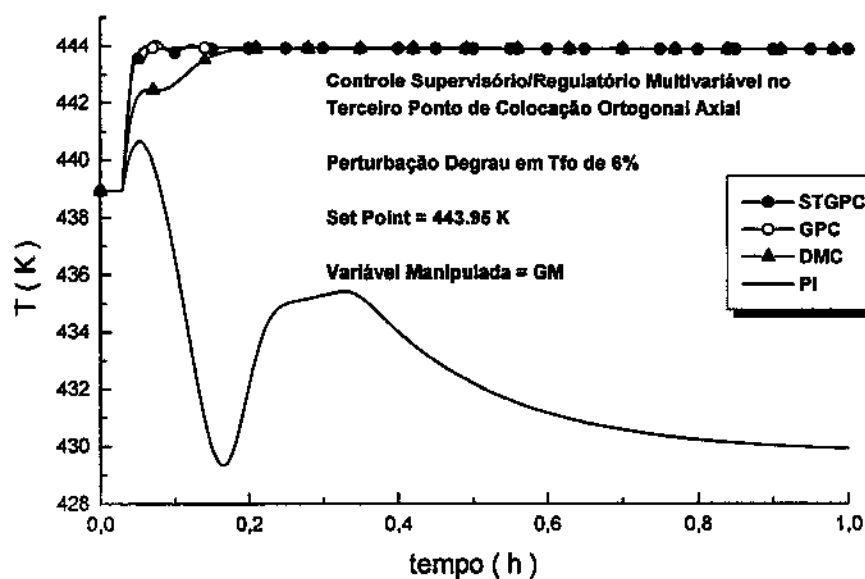


Figura VI.50 Controle Supervisório/Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

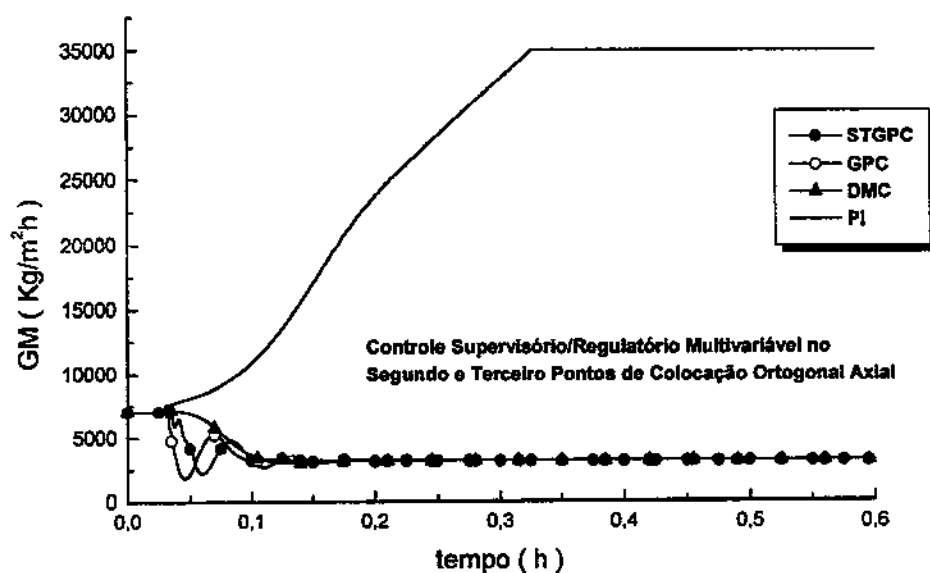


Figura VI.51 Variável Manipulada do Controle Supervisório/Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

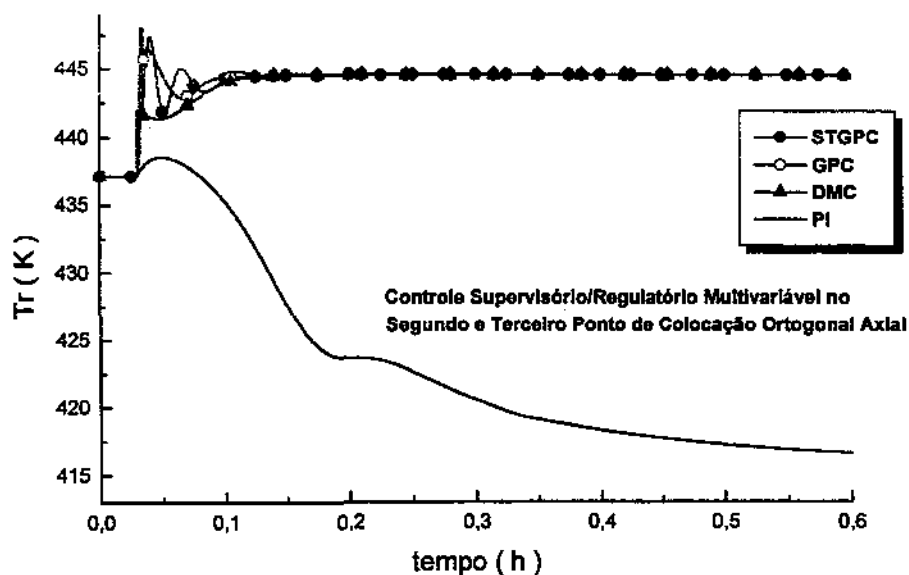


Figura VI.52 Variável Manipulada do Controle Supervisório/Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

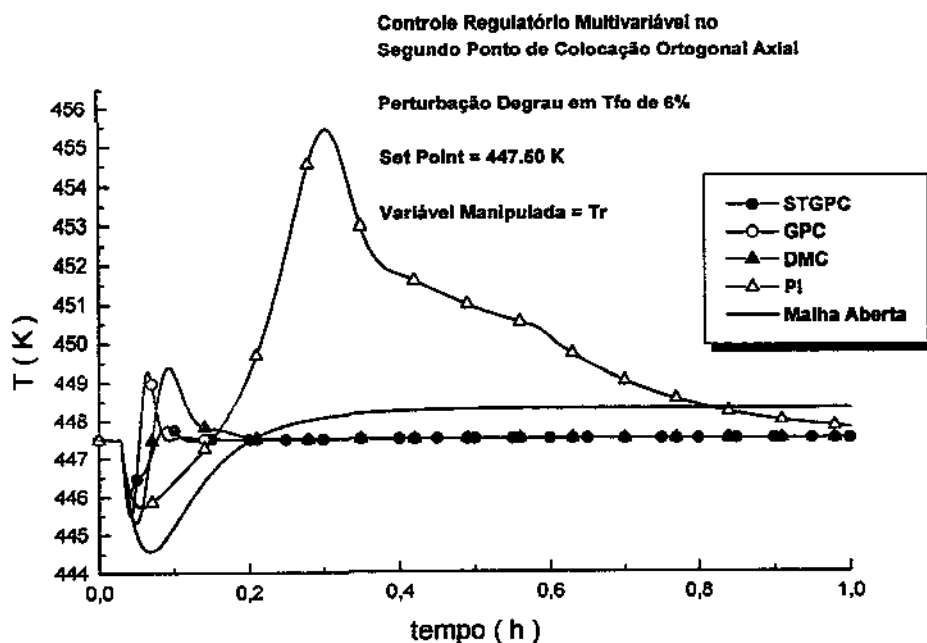


Figura VI.53 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

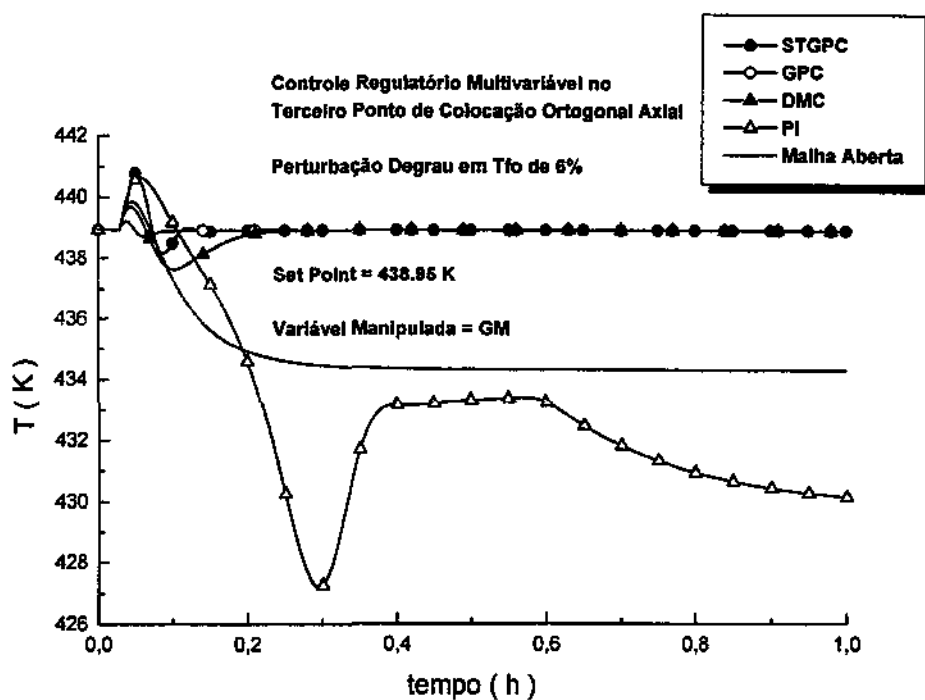


Figura VI.54 Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

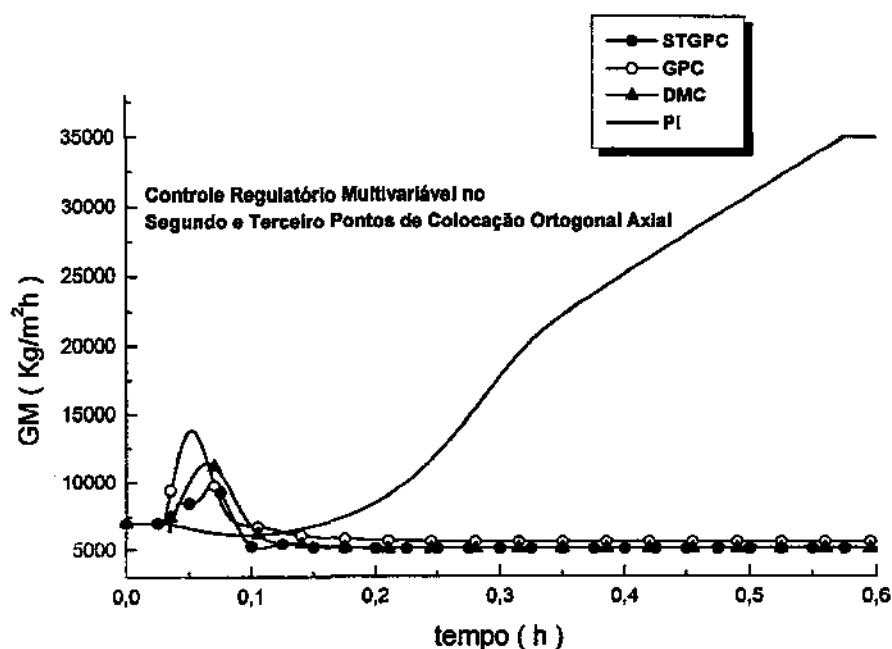


Figura VI.55 Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo



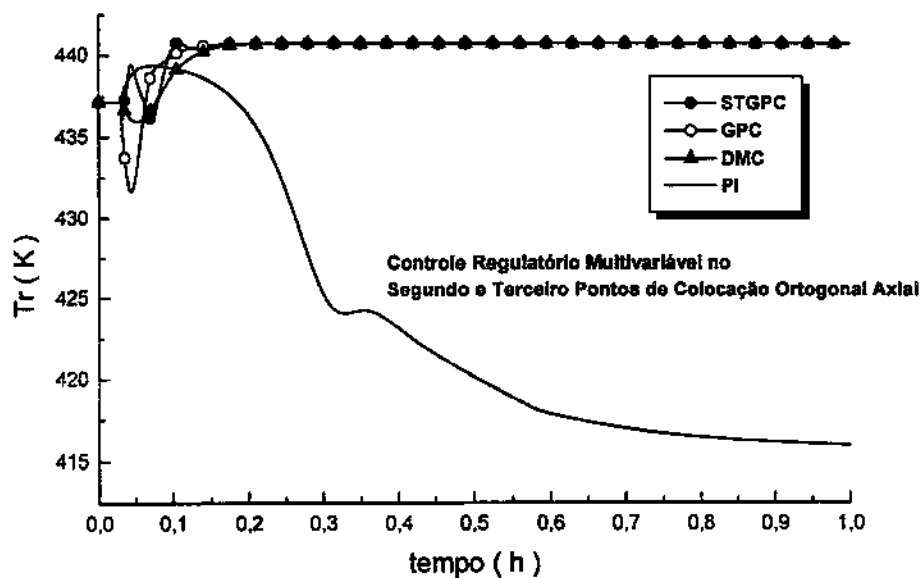


Figura VI.56 Variável Manipulada do Controle Regulatório do Reator Catalítico de Leito Fixo

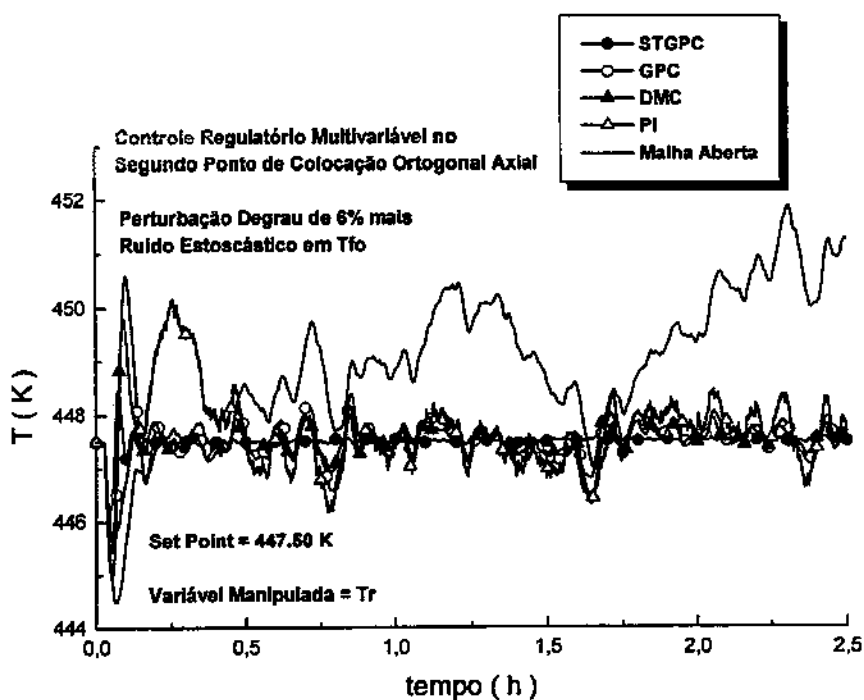


Figura VI.57 Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo

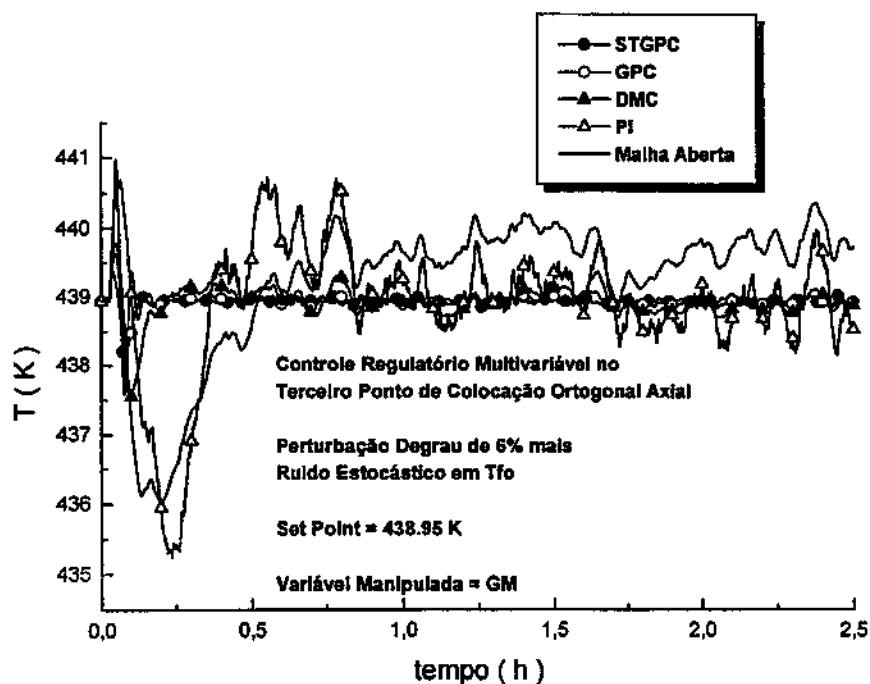


Figura VI.58 Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo

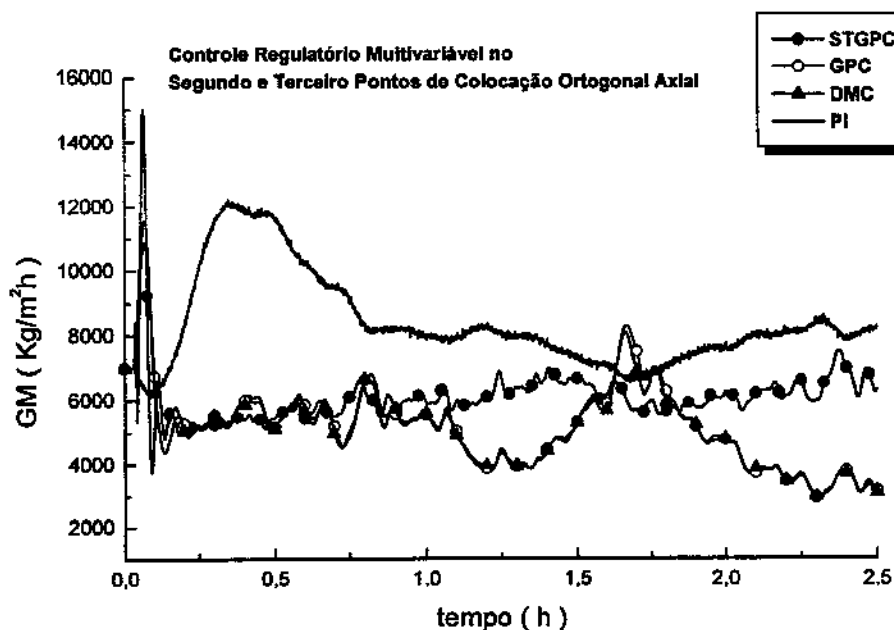


Figura VI.59 Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo

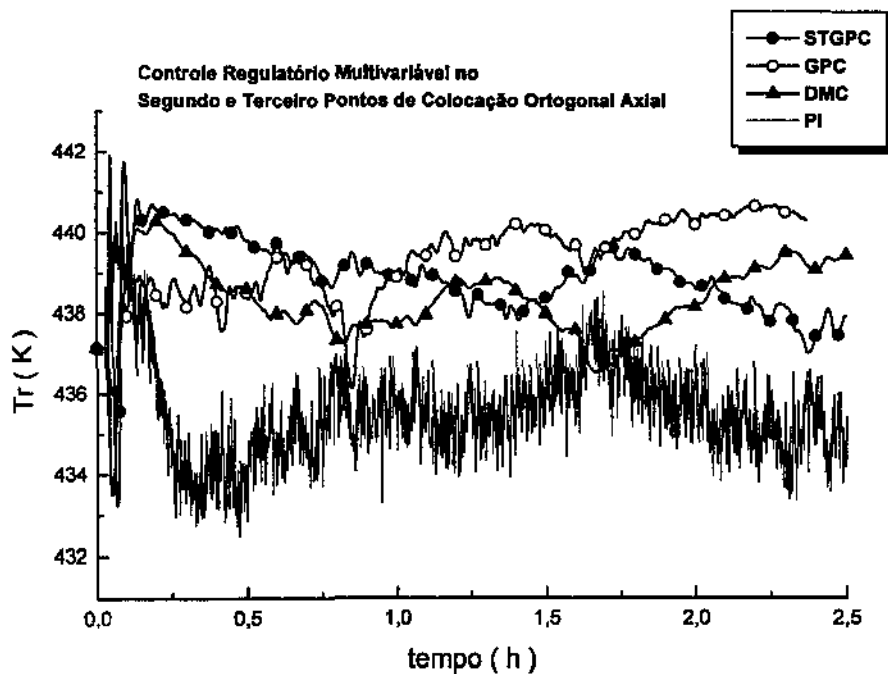


Figura VI.60 Variável Manipulada do Controle Regulatório/Estocástico do Reator Catalítico de Leito Fixo

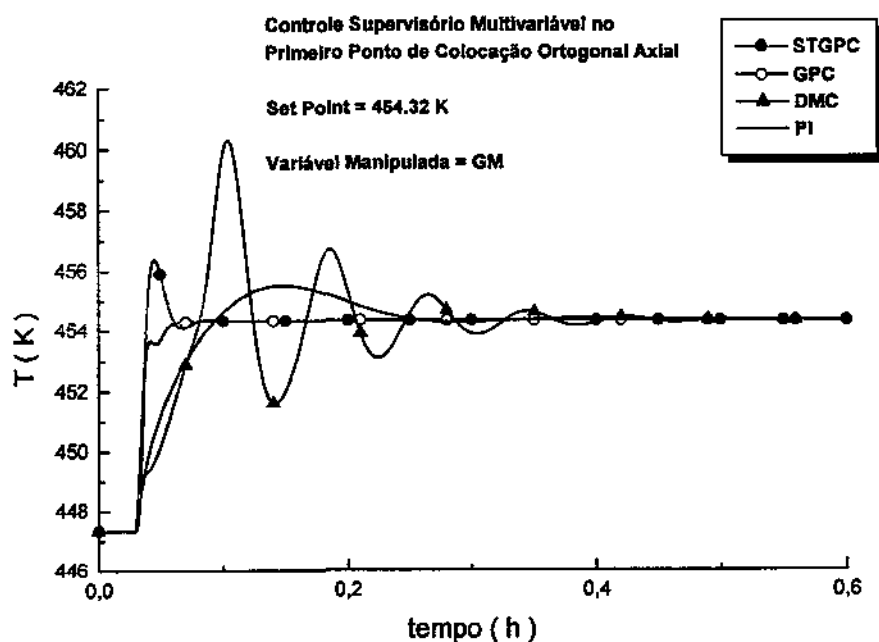


Figura VI.61 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

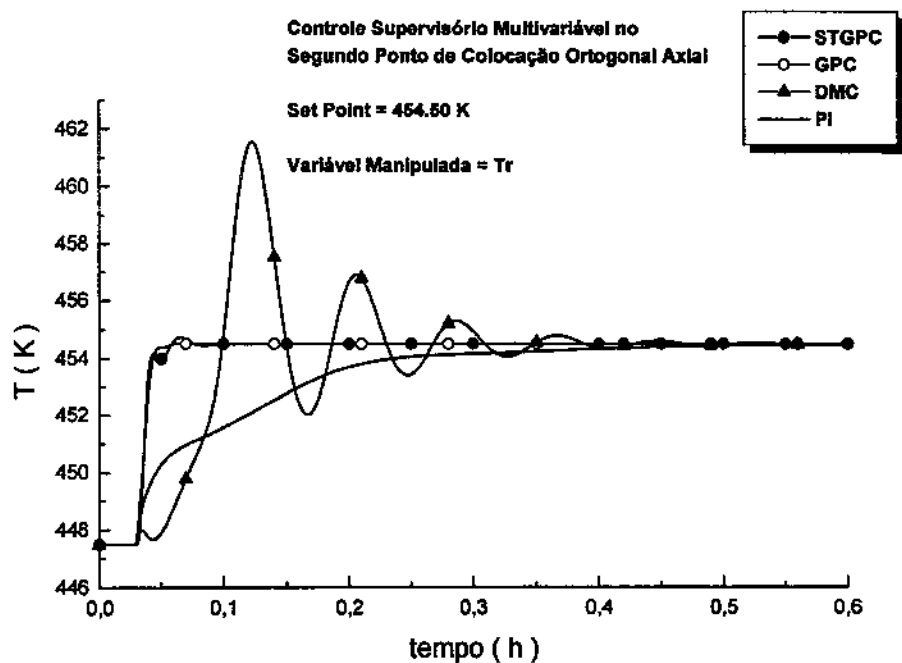


Figura VI.62 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

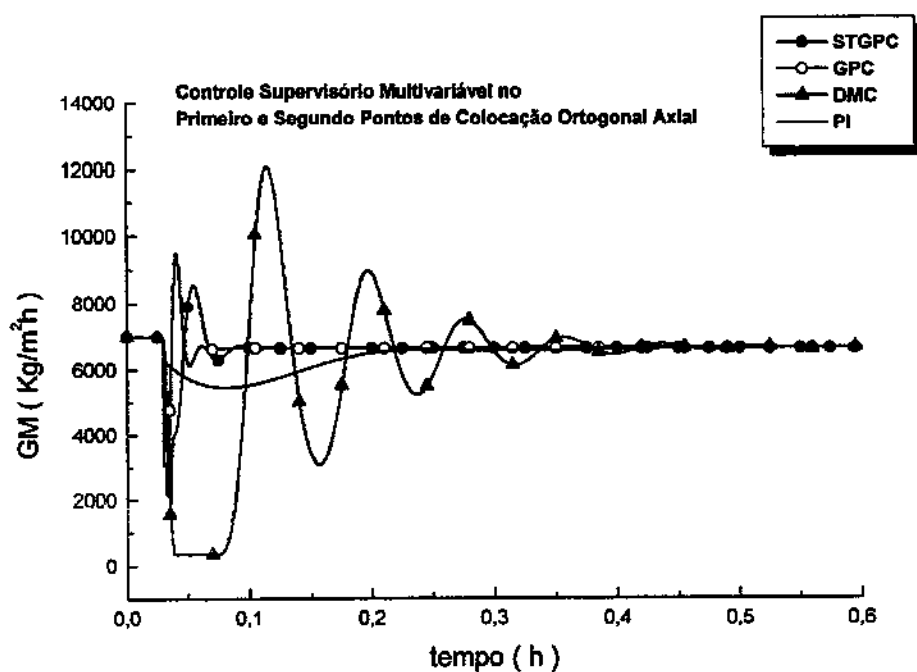


Figura VI.63 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

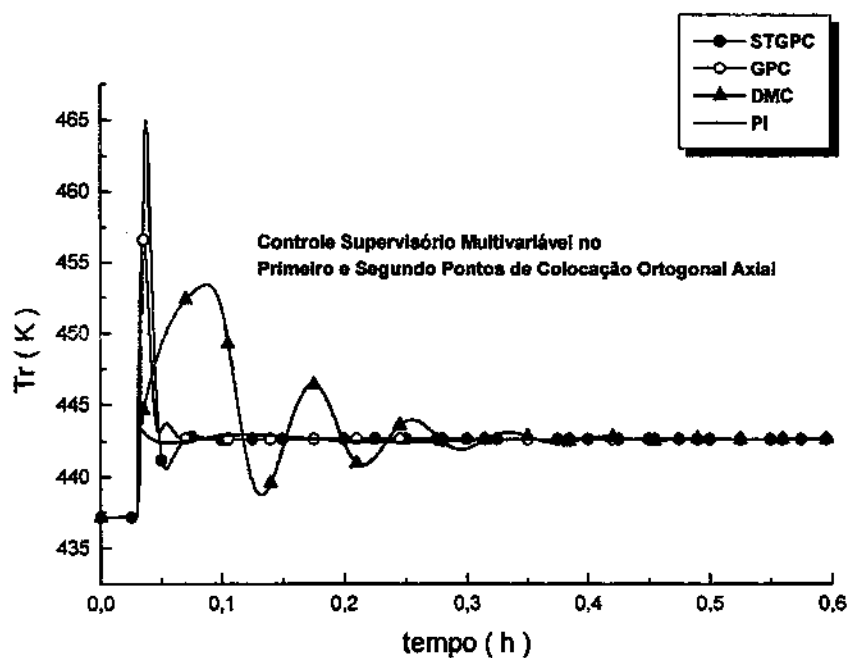


Figura VI.64 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

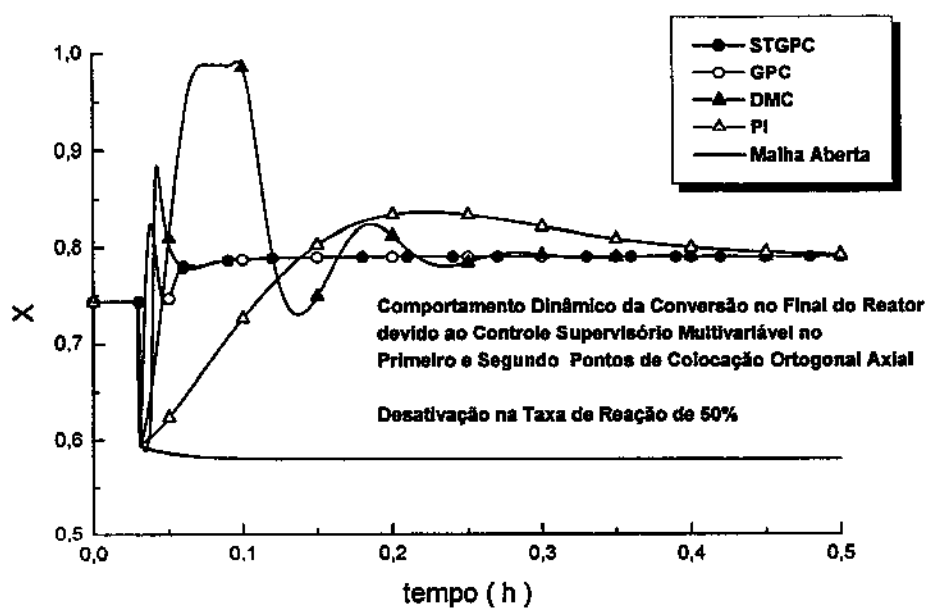


Figura VI.65 Comportamento Dinâmico no Final do Reator Catalítico de Leito Fixo

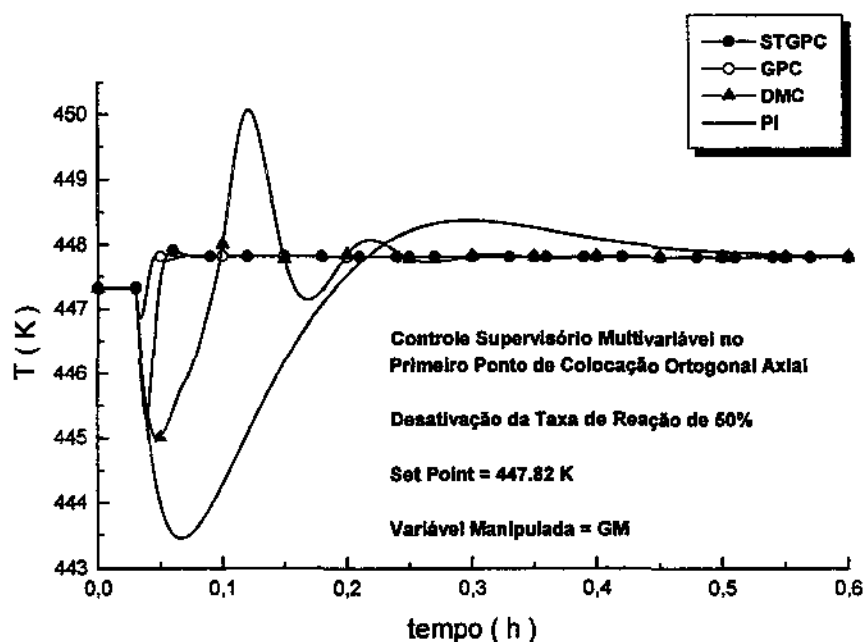


Figura VI.66 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

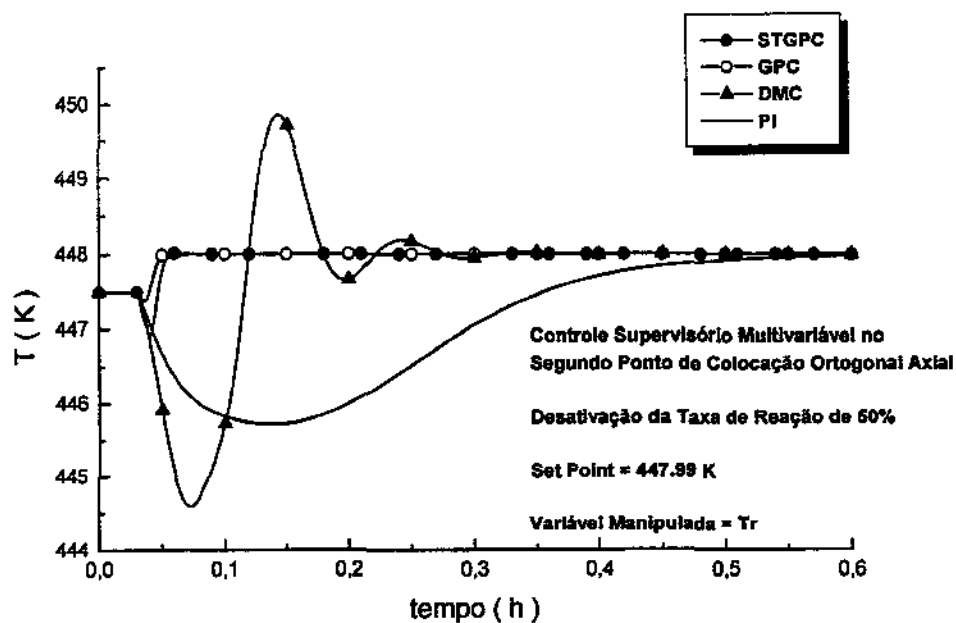


Figura VI.67 Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

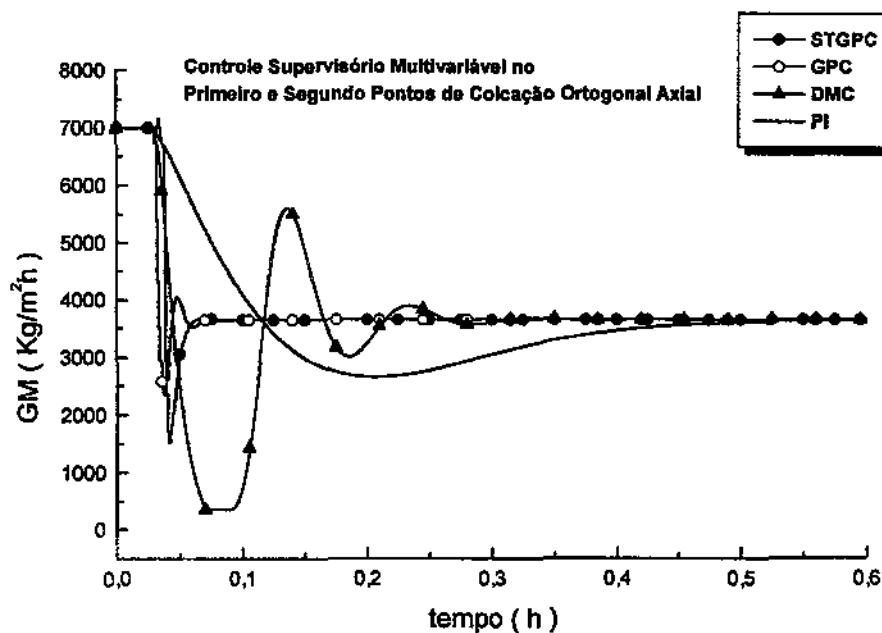


Figura VI.68 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

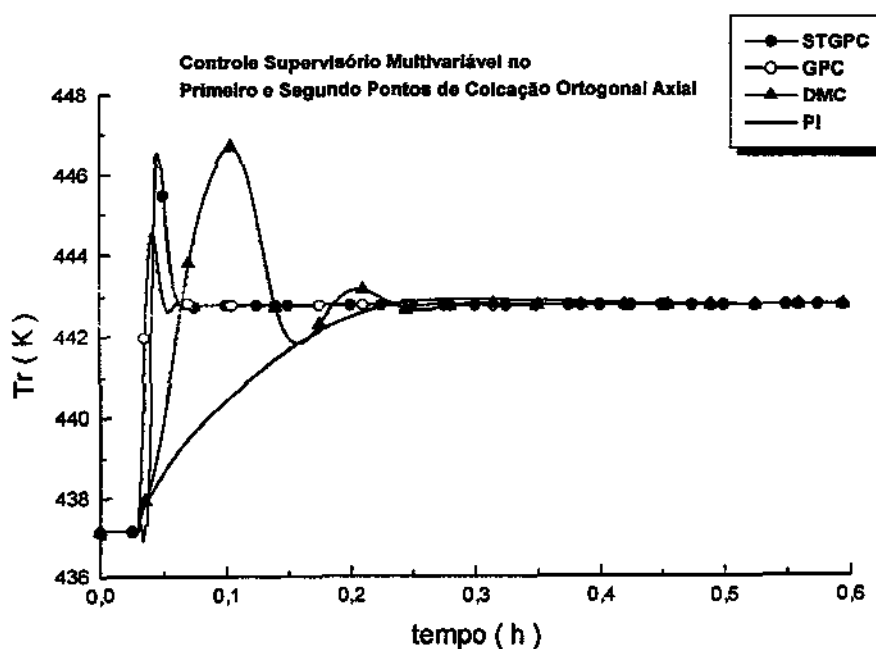


Figura VI.69 Variável Manipulada do Controle Supervisório do Reator Catalítico de Leito Fixo

## VI.8 – Conclusões

Através do uso destes algoritmos de controle, GPC, STGPC, DMC e PI, tanto na forma monovariável como na multivariável foi possível um melhor entendimento do processo em malha fechada, além de possibilitar um direcionamento do mais adequado tipo de controlador para o processo em questão. No caso o adaptativo preditivo.

Portanto, devido as características do sistema e das potencialidades dos controladores utilizados, mostra-se necessário a utilização de controladores avançados, por exemplo o STGPC e o GPC, para o controle de reatores catalíticos de leito fixo, sem o qual o controle do sistema pode ficar comprometido.

Dentro das condições de controle estudadas, a estratégia mais segura, rápida e genérica é o controle monovariável do segundo ponto de colocação axial do reator utilizando a temperatura do fluido refrigerante,  $T_r$ , como variável manipulada. A utilização deste ponto é devido ao fato desta ser a posição axial de maior sensibilidade do reator, o qual melhor permite influenciar o perfil axial de temperatura do reator e, portanto, indiretamente a conversão do reator.

Finalizando, é importante no caso de utilizar GM como variável manipulada, usar parâmetros do controlador bem conservativos e, se possível, algoritmos de controle com restrições operacionais dentro da sua formulação matemática.



## CAPÍTULO VII - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Os modelos pseudo-homogêneos estudados neste trabalho mostraram-se capazes de reproduzir qualitativamente as principais características do comportamento dinâmico dos reatores catalíticos de leito fixo encontrados na literatura e na prática, permitindo a sua utilização para estudos de controle de processos. Os modelos que melhor representaram as características dinâmicas do reator foram os bidimensionais e os modelos reduzidos gerados pela aplicação das técnicas de colocação ortogonal com um ponto radial interno (bidimensional) e de Finlayson (unidimensional).

Observou-se também que o comportamento dinâmico do reator, principalmente devido a ocorrência da resposta inversa, depende não somente da razão  $(\rho C_p)_s/(\rho C_p)_f$  na sua formulação, mas também das variações das propriedades físicas, coeficientes de transferência, pressão e temperatura de refrigeração.

A limitação do uso destes modelos se mostra quando houver necessidade de alta precisão quantitativa do comportamento dinâmico do reator, o que poderá ser obtido através de modelos heterogêneos detalhados. No entanto, estes modelos não são adequados para aplicações em controle e otimização em tempo real.

Portanto, o desenvolvimento dos modelos bidimensionais, e a apresentação dos procedimentos matemáticos e geração de modelos reduzidos relacionados com as técnicas de redução foram uma das grandes contribuições deste trabalho.

Com relação ao desempenho dos controladores avaliados, observou-se pelos resultados apresentados anteriormente a superioridade dos controladores preditivos e o adaptativo, principalmente GPC e STGPC, confirmando as sugestões da literatura. O algoritmo GPC na sua forma preditiva ou adaptativa se mostrou efetivo para o controle de reatores catalíticos de leito fixo, viabilizando implementações mais elaboradas com esse algoritmo. A estratégia de controle mais confiável e de aplicação genérica é o controle monovariável, SISO, com a temperatura do fluido refrigerante,  $T_r$ , como a variável manipulada. Esta estratégia foi a que apresentou melhor desempenho devido as dificuldades observadas quando a velocidade de fluxo mássico,  $GM$ , e a relação de alimentação ar/etanol,  $R$ , são utilizadas como variáveis manipuladas, tanto no caso monovariável, SISO, como no multivariável, MIMO.

O conhecimento apresentado em relação ao controle do reator catalítico de leito fixo (dificuldades, solução e propostas para superar estas dificuldades

e avaliação do desempenho destes algoritmos de controle) foi a outra grande contribuição deste trabalho. Conhecimento este fundamental para propor novas estratégias de controle e aprimorar a modelagem dinâmica do reator.

Para trabalhos futuros, sugere-se ampliar os estudos do comportamento dinâmico e estacionário do reator para outros valores de parâmetros de operação e projeto, para o caso multitubular, e também procurar sofisticar os modelos incluindo variações mais realistas de certos parâmetros e variáveis através de correlações e equações não estudadas, possibilitando com isto uma compreensão mais ampla do processo para fins acadêmicos e industriais. Também o uso de modelos híbridos (determinístico/rede neural), os quais exigem menor tempo computacional para a solução numérica, podem ser representações matemáticas adequadas para uso em tempo real.

Por final, sugere-se também a implementação do algoritmo de controle GPC acoplado a um algoritmo de otimização com restrições, por exemplo o SQP, buscando uma alternativa de controle que contorne algumas das limitações de controle encontradas. Também, propõem-se estudos de outras estratégias e algoritmos de controle baseados nos princípios dos controladores auto-ajustáveis (Self-Tuning Regulators – STR).

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ACRIVOS, A., Method of Characteristic Technique, Application to Heat and Mass Transfer Problems, Industrial and Engineering Chemistry - Engineering, Design, and Development, April, 1956.

AGUIAR, H. C., TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Simulação do Processo de Polpação de Celulose em um Digestor Contínuo, XXV ENEMP - Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados, São Carlos, SP, 1997.

AHMEDI, M. and FAHIEN, R. W., Tubular Reactor Design I – Two Dimensional Model, Chemical Engineering Science, 35, 889-895, 1980a.

AHMEDI, M. and FAHIEN, R. W., Tubular Reactor Design II – A Modified One Dimensional Model, Chemical Engineering Science, 35, 897-904, 1980b.

ALMEIDA, A., Avaliação do Método dos Resíduos Ponderados na Resolução de Problemas da Engenharia Química, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1987.

AMUNDSON, N. R., Mathematical Methods in Chemical Engineering, Matrices and Their Application, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1966.

ARIS, R., Introduction to the Analysis of Chemical Reactors, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1965.

ARIS, R. and AMUNDSON, N. R., Mathematical Methods in Chemical Engineering, Vol. 2, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1973.

ARIS, R., The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts, Volume I – The Theory of The Steady State, Clarendon Press, Oxford, 1975a.

ARIS, R., The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts, Volume II – Questions of Uniqueness, Stability and Transient Behaviour, Clarendon Press, Oxford, 1975b.

ASTROM, K. J. and WITTEMARK, B., Computer Controlled Systems, Theory and Design, Printece- Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1984.

AZEREDO, M. C. R., Desenvolvimento de um Software para Estudo do Comportamento Dinâmico de Reatores de Leito Fixo, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1996.

AZEVEDO, S. F., ROMERO-OGAWA, M. A., WARDLE, A. P., Modeling of Tubular Fixed Bed Catalytic Reactors; A Brief Review, Chemical Engineering Research and Design, 68(A6), 483-502, 1990.

BAIKER, A. and BERGOUGNAN, M., Investigation of a Fixed-Bed Pilot Plant Reactor by Dynamic Experimentation. Part 2. Simulation of Reactor Behaviour, The Canadian Journal of Chemical Engineering, 63, February, 146-154, 1985.

BARROS NETO, B., SCARMINIO, I. S. e BRUNS, R. E., Planejamento e Otimização de Experimentos, Editora UNICAMP, 2<sup>a</sup> Edição, Campinas, 1996.

BIERMAN, G. J., Factorization Methods for Discrete Sequential Estimation, Mathematics in Science and Engineering, Vol. 128, Academic Press, New York, 1977.

BIRD, R. B., STEWART, W. E. and LIGHFOOT, E. N., Transpor Phenomena, John Wiley & Sons, New York, 1960.

BISCAIA Jr., E. C., Análise das Características Operacionais de Reatores Multitubulares Catalíticos de Leito Fixo, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1980.

BISCAIA Jr., E. C., O Método dos Resíduos Ponderados com Aplicações em Simulação de Processos, XV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional – CNMAC, Minicurso, São Carlos, 1992.

BOLZAN, A., Controle Ótimo de Reatores Tubulares com Desativação Catalítica, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1986.

BOLZAN, A., Ajuste e Implementação de um Controle Adaptativo para um Reator Semi-Batelada, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1991.

BONVIN, D., RINKER, R. G. and MELLICHAMP, D. A., Dynamic Analysis and Control of a Tubular Autothermal Reactor at an Unstable State, Chemical Engineering Science, 35, 603-612, 1980.

BOX, G. E. P., HUNTER, W.G. and HUNTER, J. S., Statistics for Experimenters – Na Introduction to Design, Data Analysis, and Model Building, John Wiley & Sons, Inc., 1978.

BRADLEY, K. J. and ANDRE, H., A Dynamic Analysis of a Packed Gas Absorber, The Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 50, August, 1972.

BRUNS, R. E., Curso de Quimiometria, Reatório Interno, Instituto de Química/UNICAMP, Campinas, 1993.

BURDEN, R. L. and FAIRES, J. D., Numerical Analysis, Fourth Edition, PWS-KENT Publishing Company, Boston, 1989.

CABERRY, J. J. and BUT, J. B., On the Status of Catalytic Reaction Engineering, Cat. Ver. – Sci. Eng., 10, 2, 221-242, 1974.

CABERRY, J. J., Chemical and Catalytic Reaction Engineering, McGraw-Hill, Inc., 1976.

CAREY, G. F. and FINLAYSON, B. A., Orthogonal Collocation on Finite Elements, Chemical Engineerin Science, 30, 587-596, 1975.

CARNAHAN, B., LUTHER, H. A. and WILKES, J. D., Applied Numerical Methods, John Wiley & Sons, New York, 1969.

CARNEIRO, H. P., Controle Robusto de Reator Químico de Leito Fixo, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1992.

CHEN, C. Y. and SUN, C. C., Adaptive Inferential Control of Packed-Bed Reactors, Chemical Engineering Science, 46, 4, 1041-1054, 1991.

CLARKE, D. W., MOTHADI, C. and TUFFS, P. S., Generalized Predictive Control – Part I. The Basic Algorithm, *Automatica*, Vol. 23, No. 2, 137-148, 1987a.

CLARKE, D. W., MOTHADI, C. and TUFFS, P. S., Generalized Predictive Control – Part II. Extensions and Interpretations, *Automatica*, Vol. 23, No. 2, 149-160, 1987b.

CONSTANTINIDES, A., *Applied Numerical Methods with Personal Computers*, McGraw-Hill, Inc., 1978.

CHAPRA, S. C. and CANALE, R. P., *Numerical Methods for Engineers*, Second Edition, McGraw-Hill, Inc., 1989.

CORRÊA, E. J. and COTTA, R. M., Improved Lumped-Differential Formulations of Transient Heat Conduction Problems, presented at III Congress of Mechanical Engineering on North-Northeast, PA, Brazil, 1994.

CORRÊA, E. J. and COTTA, R. M., Enhanced Lumped-Differential Formulations of Diffusion Problems, Relatório Interno, Departamento de Engenharia Mecânica, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1996.

CORRÊA, N. A., Projeto de Parâmetros e Tratamento de Restrições em Controlador Preditivo DMC, Tese de Mestrado, DEQ/UFSCar, São Carlos, 1995.

CREMASCO, M. A., *Fundamentos de Transferência de Massa*, Editora UNICAMP, Campinas, 1998.

CUNHA, C., *Métodos Numéricos – Para as Engenharias e Ciências Aplicadas*, Editora UNICAMP, Campinas, 1993.

DAVIS, M. E., *Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1984.

DECHECHI, E. C., Controle “DMC” de um Processo de Fermentação Alcoólica Contínua em Escala Industrial, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1996.

DECHECHI, E. C., Controle Avançado Preditivo Adaptativo – “DMC Multivariável Adaptativo”, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1998.

DESPHANDE, P. B. and ASH, R. H., Elements of Computers Process Control with Advanced Control Applications, Instrument Society of America, North Carolina, USA, 1981.

DESPHANDE, P. B., Distillation Dynamics and Control, Instrument Society of America, North Carolina, USA, 1985.

DESPHANDE, P. B., Multivariable Process Control, Instrument Society of America, 1989.

DIXION, A. G., An Improved Equation for the Overall Heat Transfer Coefficient in Packed Beds, Chemical Engineering and Processing, 35, 323-331, 1996.

DOMINGUES, A., Modelagem e Simulação de Processo de Oxidação do Etanol a Acetaldeído, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1992.

DORAISWAMY, L. K. and SHARMA, M. N., Heterogeneous Reactions: Analysis, Examples and Reactor Design: Gas-Solid and Solid-Solid Reactions, Vol.1, John Willey & Sons, Inc, 1984.

DOYLE, F. J., BUDMAN, H. M. and MORARI, M., “Linearizing” Controller Design for a Packed-Bed Reactor Using a Low-Order Wave Propagation Model, Ind. Eng. Chem. Res., 35, 3567-3580, 1996.

DUARTE, S. I. P. and LEMCOFF, N. O., Analysis of Fixed Bed Catalytic Reactor Models, ACS Symposium Series 237, American Chemical Society, 239-254, 1984.

EHIRIM, E. O., Contribuição ao Estudo de Controladores Preditivos Multivariáveis, Tese de Mestrado, DEQ/UFSCar, São Carlos, 1995.

ENDER, L., Controle Preditivo Generalizado. Uma Aplicação, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1990.

FIGUEIREDO, J. L. e RIBEIRO, F. R., *Catálise Heterogênea*, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1987.

FINLAYSON, B. A., *Packed Bed Reactor Analysis by Orthogonal Collocation*, Chem. Eng. Sci., 26, 1081-1091, 1971.

FINLAYSON, B. A., *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles*, Academic Press, Inc., 1972.

FINLAYSON, B. A., *Orthogonal Collocation in Chemical Reaction Engineering*, Cat. Rev.-Sci. Eng., 10(1), 69-138, 1974.

FINLAYSON, B. A., *Nonlinear Analysis in Chemical Engineering*, McGraw-Hill, Inc., 1980.

FOGLER, H. S., *Element of Chemical Reaction Engineering*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1986.

FREITAS, M. F., *Solução de Equações Algébricas Não-Lineares por Métodos de Continuação Homotópica*, Relatório Interno, DEQ/UFBA, Salvador, 1992.

FROMENT, G. F., *Fixed Bed Reactor Design*, Chemical Engineering: Concepts and Reviews, Vol. 3, Gordon and Breach Science Publishers S. A., 179-212, 1986.

FROMENT, G. F. and HOFMANN, H. P. K., *Chemical Reaction and Reactor Engineering*, Design of Fixed-Bed Gas-Solid Catalytic Reactors, ed. Carbery & Varma, 373-440, Marcel Dekker, New York, 1987.

FROMENT, G. F. and BISCHOFF, K.B., *Chemical Reactor Analysis and Design*, 2th ed., John Wiley & Sons, New York, 1990.

HAGAN, P. S., HERSKOWITZ, M. and PIRKLE, C., *Equilibrium Temperature Profiles in Highly Sensitive Tubular Reactors*, SIAM J. Appl. MATH., 47, 6, 1287-1305, 1987.



HAGAN, P. S., HERSKOWITZ, M. and PIRKLE, C., A Simple Approach to Highly Sensitive Tubular Reactors, SIAM J. Appl. MATH., 48, 5, 1083-1101, 1988a.

HAGAN, P. S., HERSKOWITZ, M. and PIRKLE, C., Runaway in Highly Sensitive Tubular Reactors, SIAM J. Appl. MATH., 48, 6, 1437-1450, 1988b.

HARRIS, C. J. and BILLINGS, S. A., Self-Tuning and Adaptive Control. Theory and Applications, Peter Peregrinus Ltd., London, 1985.

HILL, C. G. Jr., An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design, John Wiley & Sons, New York, 1977.

HIMMELBLAU, D. M. and BISCHOFF, K. B., Process Analysis and Simulation, John Wiley & Sons, Inc., 1968.

HLAVACEK, V. and Van ROMPAY, P., Simulation of Countercurrent Separation Processes Via Global Approach, Computers & Chemical Engineering, 9, 4, 343-350, 1985.

HODGSON, A. J. F., Problems of Integraty in Applications of Adaptive Controllers, Report nº OUEL 1436/82, University of Oxford, 1983.

HOLLAND, C. D. & ANTHONY, R. G., Fundamentals of Chemical Reaction Engineering, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1979.

HOLAND, C. D. and LIAPIS, A. I., Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems, McGraw-Hill Book Company, 1983.

GIUDICI, R., Modelagem de Reator de Oxidação de Etileno: Estudo de Parâmetros Térmicos e Estratégia de Diluição de Catalisador, Tese de Doutorado, DEQ, USP, 1990.

INCROPERA, F. P. and WITT, D. P., Fundamentals of Heat and Mass Transfer, Second Edition, JohnWiley & Sons, Inc., 1981.

ISERMAN, R., Digital Control Systems, Springer-Verlag, Berkin, 1981.

JORGE, L. M. M., Estudo Experimental e Modelagem Matemática de Reator Catalítico de Leito Fixo: Transferência de Calor em Sistemas sem e com Reação de Reforma a Vapor de Metano, Tese de Doutorado, DEQ, USP, 1998.

JORGENSEN, S. B. and JENSEN, N., Dynamic and Control of Chemical Reactors – Selectively Surveyed, IFAC Dynamics and Control of Chemical Reactors, Netherlands, 49-67, 1989.

JUTAN, A., TREMBLAY et al., Multivariable Computer Control of a Butane Hydrogenolysis Reactor: Part 1. State Space Reactor Modeling, AIChE J., 23, 5, 732 - 742, September 1977.

KARANTH, N. G. and HUGHES, R., Mathematical Modeling of Heterogeneous Catalytic Reactors, Cat. Ver. – Sci. Eng., 9, 2, 169-208, 1974.

KHANNA, R. and SEINFELD, J. H., Mathematical Modeling of Packed Bed Reactors: Numerical Solutions and Control Model Development, Advances in Chemical Engineering, Academic Press Inc., 16, 227-235, 1987.

KHESGHI, H. S., HAGAN, P. S., REYES, S. C., PIRKLE, J. C. Jr., Transient in Tubular Reactors: Compararison of One and Two Dimensional Models, AIChE Journal, 34, 8, 1373-1375, 1988.

KOVACH, J. W. and SEIDER, W. D., Heterogeneous Azeotropic Distillation-Homotopy-Continuation Methods, Comput. Chem. Engng., 11, 6, 593-605, 1987.

KUBICEK, M. and MAREK, M., Computational Methods in Bifurcation Theory and Dissipative Structures, Springer-Verlag, Inc., New York, 1983.

KUBICEK, M. and HLAVACEK, V., Numerical Solution of Nonlinear Boundary Value Problems with Applications, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.

KUNO, M. and SEADER, J. D., Computing All Real Solutions to Systems of Nonlinear Equations with a Global Fixed-Point Homotopy, Ind. Eng. Chem. Res., 27, 1320-1329, 1988.

KWONG, W. H., Otimização de Plantas Industriais Complexas, Tese de Doutorado, DPQ, USP, São Paulo, 1992.

KWONG, W. H., Método da Colocação Ortogonal – Introdução à Teoria e Prática, Monografia, DEQ/UFSCar, São Carlos, 1993.

LAPIDUS, L. and AMUNDSON, N. R., Chemical Reactor Theory – A Review, Prentice – Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1977.

LEROU, J. J. and FROMENT, G. F., Velocity, Temperature and Conversion Profiles in Fixed Bed Catalytic Reactors, Chemical Engineering Science, 32, 853-861, 1977.

LEVENSPIEL, O. , Engenharia das Reações Químicas, Volume 1 – Cinética Química Aplicada, Editora Edgard Blucher Ltda, 1983a.

LEVENSPIEL, O. , Engenharia das Reações Químicas, Volume 2 – Cálculo de Reatores, Editora Edgard Blucher Ltda, 1983b.

LEVENSPIEL, O., The Chemical Reactor Omnibook, OSU Book Stores Inc., Couallis, Oregon, 1989.

LIMA, E. L., Estimativa de Parâmetros em Sistemas de Engenharia Química, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1981.

LIN, W. J., SEADER, J. D. and WAYBURN, T. L., Computing Multiple Solutions to Systems of Interlinked Separation Columns, AIChE Journal, June, 33, 6, 886-897, 1987.

LIU, L. H., ZHOU, X. G. and YUAN, W. K., A New On-Line Parameter Estimation Strategy for Fixed-Bed Reactors, Chemical Engineering Science, 51, 11, 3071-3076, 1996.

LOPES, L. C. O., Análise de Bifurcações em Sistemas com Reação Química, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1990.

LUCENA, S., Estratégia de Redução de Ordem Aplicada à Simulação de Reatores Multitubulares, Tese de Mestrado, COPPE/UNICAMP, Rio de Janeiro, 1991.

LUIZE, A., Avaliação de Técnicas Numéricas para a Resolução de Problemas com Reação Química, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1991.

LUYBEN, W. L., Stability of Autorefrigerated Chemical Reactors, AIChE Journal, 662-668, 1966.

LUYBEN, W. L., Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers, McGraw-Hill Book Company, Fourth Edition, 1990.

MACIEL FILHO, R., Oxidação Catalítica de Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Óxido de Ferro-Molibdênio, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1985.

MACIEL FILHO, R., Modeling and Control of Multitubular Reactors, Ph.D. Thesis, University of Leeds, Leeds, 1989.

MACIEL FILHO, R., MOURA, J. C. e McGREAVY, C., Regimes Cinéticos e Desativação de Catalisadores de Fe-Mo na Oxidação do Etanol a Acetaldeído, 12<sup>o</sup> Simpósio Ibero-Americano de Catálise, Rio de Janeiro, Brasil, 10-20, 1990.

MACIEL FILHO, R. and DOMINGUES, A., A Multitubular Reactor for Obtention of Acetaldehyde by Oxidation of Ethyl Alcohol, ISCRE 12 (Twelfth International Symposium on Chemical Reaction Engineering), Turim, Itália, 1992.

MACIEL FILHO, R., Curso de Reatores Químicos, Relatório Interno, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1993.

MATTEDI, A., Projeto de um Controlador DMC para o processo CARE, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1999.

McDERMOTT, P. E., MELLICHAMP, D. A. and RINKER, R. G., Pole-Placement Self-Tuning Control of a Fixed-Bed Autothermal Reactor, Part I: Single Variable Control, AIChE Journal, June, 32, 6, 1004-1023, 1986.

McGREAVY, C. and NAIM, H., Reduced Dynamic Model of a Fixed Bed Reactor, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 55, June, 326-332, 1977.

McGREAVY, C., On-Line Control System for Chemical Reaction Process, *Computers Chem. Eng.*, 7, 4, 529-566, 1983.

McGREAVY, C. and IKPONMWOSA, A. N., Experimental Study of Thermal Dynamics of a Non-isothermal, No-adiabatic Fixed Bed Catalytic Reactor, XI Simp. Iberoam. Cat. Guanajuato, Mexico, 1373-1380, 1988.

McGREAVY, C. and MACIEL FILHO, R., Influence of Flow Distribution on Heat Transfer in Multitubular Catalytic Reactors, 3rd Latin American Conf. Heat and Mass Tr., Mexico, 1988.

McGREAVY, C. and MACIEL FILHO, R., Dynamics and Control of Chemical Reactors, presented at IFAC Dynamic and Control of Chemical Reactors, Maastricht, The Netherlands, 1989.

MIHAEL, R. and IORDACHE, C., Performances of Some Numerical Techniques Used for Simulation of Fixed Bed Catalytic Reactors, *Chem. Eng. Sci.*, 31, 83-86, 1976.

MOHTADI, C., SHAH, S. L. and CLARKE, D. W., Generalized Predictive Control of Multivariable Systems, Report nº OUEL 1640/86, University of Oxford, 1986.

MORSHEDI, A. M., CUTLER, C. R. and SKROVANEK, T. A., Optimal Solution of Dynamic Matrix Control with Linear Programming Techniques (LDMC), *Proceedings of the ACC*, 1985.

MOURA, J. C., Oxidação de Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Cobre Oxidado, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1984.

NAJIM, K., Control of Liquid-Liquid Extraction Columns, Gordon and Breach Science Publishers, 1988.

NAUMAN, E. B., Chemical Reactor Design, John Wiley & Sons, New York, 1987.

ODLOAK, D., Desenvolvimento e Aplicação de Controladores Preditivos na Indústria Química, Tese de Livre Docente, DEQ/USP, São Paulo, 1994.

ODLOAK, D., Controle Preditivo de Processos Químicos, XI Congresso Brasileiro de Automática, Sociedade Brasileira de Automática, Mini-Cursos, São Paulo, 61-86, 1996.

OGUNNAIKE, B. A. and RAY, W. H., Process Dynamics Modeling and Control, Oxford University Press, Inc., New York, 1994.

PATWARDHAN, A. A., WRIGHT, G. T. and EDGAR, T. F., Nonlinear Model-Predictive Control of Distributed-Parameter Systems, Chemical Engineering Science, 47, 4, 721-735, 1992.

PEREIRA, C. J., WANG, J. B. and VARMA, A., A Justification of the Internal Isothermal Model for Gas-Solid Catalytic Reactions, AIChE Journal, 25(6), 1036-1043, 1979.

PINTO, J. M., Controle por Matriz Dinâmica em Coluna de Destilação, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1990.

PINTO, J. C. e LAGE, P. L. C., Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1997.

PIRKLE Jr., J. C., REYES, S. C., HAGAN, P. S. and KHESGHI, H., Solution of Dynamic Distributed Parameter Model of Nondiabatic, Fixed-Bed Reactor, Comput. Chem. Engng., 11 (6), 737-747, 1987.

PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY, S. A. and VETTERLING, W. T., Numerical Recipes, Cambridge University Press, 1989.

QUINTA FERREIRA, R. M., COSTA, A. C. and RODRIGUES, A. E., Dynamic Behavior of Fixed-Bed Reactors with "Large-Pore" Catalysts: A Bidimensional Heterogeneous Diffusion/Convection Model, Computers Chem. Engng., 16, 8, 721-751, 1992.

REID, R. C., PRAUSNITZ, J. M. and POLING, B. E., The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill Book Company, 4ª edição, 1987.

RICE, R. G. and DO, D. D., *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers*, John Wiley & Sons, Inc., 1995.

RION, W. L. and VAN BRUNT, V., *Differential Geometry Based Homotopy Continuation*, *Comput. Chem. Engng.*, 14, 8, 889-900, 1990.

ROCCO Jr., D. B. F., *Modelagem e Simulação de Polimerização em Processo de Suspensão com Catalisador tipo Ziegler-Natta*, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1991.

RODRIGUES, J. A. D., *Dinâmica e Estratégias de Otimização e Controle do Processo de Penicilina*, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1996a.

RODRIGUES, M. A., *Controle Preditivo Não-Linear de Processos Químicos*, Tese de Mestrado, DEQ/USP, São Paulo, 1996b.

RUBIÃO, L. E. G., *Controle de Processos Químicos Multivariáveis*, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1990.

SANTOS, A. M. N., *Reatores Químicos, Conceitos Básicos e Projecto de Reatores Ideais*, Volume 1, Fundação Calostre Gulbenkian, Lisboa, 1990.

SCHIESSER, W. E., *The Numerical Method of Lines Integration of Partial Differential Equations*, Academic Press, Inc., 1991.

SEADER, J. D., KUNO, M., LIN, W. J., JOHSON, S. A., UNSWORTH, K. and WISKIN, J. W., *Mapped Continuation Methods for Computing all Solutions to General Systems of Nonlinear Equations*, *Computers Chem. Engng.*, 14, 1, 71-85, 1990.

SEBORG, D. E., EDGAR, T. F. and SHAH, S. L., *Adaptive Control Strategies for Process Control: A Survey*, *AIChE Journal*, 32, 6, 881-913, 1986.

SEBORG, D. E., EDGAR, T. F. and MELLICHAMP, D. A., *Process Dynamics and Control*, John Wiley & Sons, Inc., 1989.

SECCHI, A. R., Controle Adaptativo de Colunas de Destilação Utilizando Modelos Reduzidos, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1988.

SEGALL, N. L., MCGREGOR, J. F. and WRIGHT, J. D., Collocation Methods for Solving Packed Bed Reactor Models with Radial Gradients, The Canadian Journal of Chemical Engineering, 62, December, 808-817, 1984.

SILEBI, C. A. and SCHIESSER, W. E., Dynamic Modelling of Transport Process Systems, Academic Press, Inc., 1992.

SILVA, S. L. C., Modelagem e Simulação de Extratores para Separação de Terras Raras, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1992.

SMITH, C. A. and CORRIPIO, A. B., Principles and Practice of Automatic Process Control, John Wiley & Sons, Inc., 1985.

SOARES, C. B. P., Simulação de Processos Complexos de Separação em Estágios com o Auxílio de Técnicas de Continuação Homotópica, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1992.

SOUZA JÚNIOR, M. B., Controle Preditivo de Longo Alcance: Uma Investigação, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1989.

SOUZA, M. E., Controle de Processos Não Lineares, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1993.

STARK, P. A., Introdução aos Métodos Numéricos, Editora Interciência, Rio de Janeiro, 1984.

STEPHANOPOULOS, G., Chemical Process Control, Na Introduction to Theory and Practice, Prentice-Hall, Inc., New Jersey, 1984.

STINGHEN, A., O., Estratégias de Otimização de Processos, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1998.

STREMEL, D. P., TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Estratégias de Redução para Modelos Dinâmicos Envolvendo Processos Químicos e Bioquímicos em Reatores de Leito Fixo, XXV ENEMP - Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados, São Carlos, SP, 1997.



STREMEL, D. P., TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelos Dinâmicos Reduzidos para Reatores Multifásicos: Químicos e Bioquímicos, XIII Congresso Chileno de Ingenieria Quimica, ELAIQ'98 – II Encuentro Latino-Americano de Ingenieria Quimica, Chile, pag. 699-707, 1998.

STREMEL, D. P., TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Analysis of Different Reduction Techniques in Kynetic Dynamic Models for Biochemical and Catalytic Chemical Processes on Fixed Bed Reactors, The Fourth Italian Conference on Chemical and Process Engineering – IcheaP-4, Florence, Italy, 1999.

TOLEDO, E. C. V., Modelagem e Controle de um Reator de Polimerização CSTR Acoplado a um Condensador Horizontal Semi-Inundado, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1992.

TOLEDO, E. C. V., Estudo do Comportamento Dinâmico de Reatores Catalíticos de Leito Fixo, Relatório Interno, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1994.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelos Reduzidos para Controle Avançado de Reatores de Leito Fixo, X COBEQ - Congresso Brasileiro de Engenharia Química, São Paulo, SP, Setembro, 1994a.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelos Reduzidos para Controle Avançado de Reatores de Leito Fixo, ELAIQ'94 - Encuentro Latino-Americano de Ingenieria Quimica, Chile, pag. 36-41, 1994b.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelos de Reatores Catalíticos de Reatores de Leito Fixo para Aplicações em Tempo Real, IV Congresso Argentino de Ingenieria Quimica, Argentina, Outubro, 1994c.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Aproximações Numéricas para a Solução de Modelos de Reatores Catalíticos de Leito Fixo, XVI CILAMCE - Congresso Íbero Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia, Curitiba, PR, Outubro, 1995.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelos Dinâmico Reduzido para um Reator Catalítico de Leito Fixo, XI COBEQ - Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Rio de Janeiro, RJ, Setembro, 1996a.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., A Modified Dynamic Reduced Model of Fixed Catalytic Reactors - Inverse Response Analysis, 12<sup>th</sup> International Congress of Chemical and Process Engineering - CHISA'96, Praha, Czech Republic, 1996b.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., A Modified Dynamic Reduced Model of Fixed Catalytic Reactors - Inverse Response Analysis, 5<sup>th</sup> World Congress of Chemical Engineering, San Diego, California, USA, Vol. 1. pg. 1064-1069, 1996c.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelagem, Simulação e Controle de um Reator Catalítico de Leito Fixo, XXIV ENEMP - Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados, Uberlândia, MG, 1996d.

TOLEDO, E. C. V., Modelagem, Simulação e Controle de Reatores Catalíticos de Leito Fixo, Relatório Interno, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1997.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Reduced Reliable Models for Fixed Bed Catalytic Reactors: Control Applications, ECCE-1 - The First European Congress on Chemical Engineering, pg. 93-96, Vol. 1, Florence, Italy, May 4-7, 1997a.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Dynamic and Advanced Control of a Fixed Bed Catalytic Reactors, ENPROMER'97 - 1<sup>o</sup> Congresso de Engenharia de Processos do Mercosul, pg. 69-70, Bahia Blanca, Argentina, 1 al 4 Setiembre, 1997b.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Desenvolvimento de Modelos Internos e Avaliação de Controladores Avançados em Reatores de Leito Fixo, XVII CILAMCE - Congresso Íbero Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia, Brasília, DF, Outubro, 1997c.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Análise de Sensibilidade Paramétrica e Controle Multivariável de um Reator Catalítico de Leito Fixo,

XXV ENEMP - Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados, São Carlos, SP, 1997d.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Comportamento Dinâmico e Estratégias de Controle Avançado para um Reator Catalítico com Desativação de Catalisador, XIII Congresso Chileno de Ingenieria Quimica, ELAIQ'98 – II Encuentro Latino-Americano de Ingenieria Quimica, Chile, pag. 716-724, 1998a.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Avaliação de Controladores Avançados na Política Operacional de Reatores Catalíticos de Leito Fixo, XII COBEQ - Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Porto Alegre, RS, Setembro, 1998b.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Discriminação de Modelos Reduzidos para Sistemas de Leito Fixo, XXVI ENEMP - Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados, Teresópolis, RJ, 1998c.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelos Dinâmicos e a Avaliação de Diferentes Controladores Avançados em Reatores Catalíticos de Leito Fixo, XVIII Interamerican Congress of Chemical Engineering, San Juan, Puerto Rico, December 6 to 10, 1998d.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Building Reduced Models for Advanced Control of Fixed Bed Catalytic Reactors, The Fourth Italian Conference on Chemical and Process Engineering – IcheaP-4, Florence, Italy, 1999a.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Development of Dynamic Models for Control and Parametric Sensitivity Study of Fixed Bed Catalytic Reactor, ENPROMER'99 – 2º Congresso de Engenharia de Processos do Mercosul, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil, 30 de Agosto a 02 de Setembro, a ser publicado, 1999b.

TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Controle Multivariável de um Reator Catalítico de Leito Fixo com Desativação de Catalisador, ENPROMER'99 – 2º Congresso de Engenharia de Processos do Mercosul, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil, 30 de Agosto a 02 de Setembro, a ser publicado, 1999c.

TOUZANI, A., KLVANA, D. and BELANGER, G., A Mathematical Model for the Dehydrogenation of Methylcyclohexane in a Packed Bed Reactor, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 65, February, 56-63, 1987.

TRESMONDI, A., Determinação de Parâmetros em Processos Reativos Industriais, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1995.

TUFFS, P. S., Self-Tuning Control: Algorithms and Applications, Report nº OUEL 1567/85, University of Oxford, 1985.

VASCONCELOS, L. G. S., Procedimento para Modelagem, Otimização e Controle de Secadores de Leito Móvel, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1997.

VARMA, A., Packed Bed Reactors: An Overview, ACS Symposium Series 168, American Chemical Society, 279-286, 1981.

VICKERY, D. J. and TAYLOR, R., Path-Following Approaches to the Solution of Multicomponent, Multistage Separation Process Problems, *AIChE Journal*, April, 32, 4, 547-556, 1986.

VILLADSEN, J., Selected Approximation Methods for Chemical Engineering Problems, Institutet for Kemiteknik, Numerisk Institut, Danmarks Tekniske Højskole, 1970.

VILLADSEN, J. & MICHELSEN, M.L., Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation, Prentice-Hall, New Jersey, 1978.

VILLADSEN, J. and MICHELSEN, M. L., Numerical Methods in Reaction Engineering, Chemical Reaction and Reactor Engineering, ed. Carberry and Varma – Marcel Dekker, New York, 1-62, 1987.

WAYBURN, T. L. and SEADER, J. D., Homotopy Continuation Methods for Computer-Aided Process Design, *Comput. Chem. Engng.*, 11, 1, 7-25, 1987.

WESTERTERP, K. R., VANSWAAY, W. P. M. and BEENACKERS, A. A. C. M., Chemical reactor Design and Operation, John Wiley & Sons, 1984.

WINDES, L. C. and RAY, W. H., A Control Scheme for Packed Bed Reactors Having a Changing Catalyst Activity Profile. I. On-line Parameter Estimation and Feedback Control, J. Proc. Cont., 2, 23, 1992a.

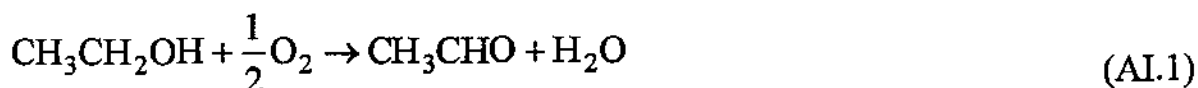
WINDES, L. C. and RAY, W. H., A Control Scheme for Packed Bed Reactors Having a Changing Catalyst Activity Profile. I. On-line Optimizing Control, J. Proc. Cont., 2, 43, 1992b.

WRIGHT, G. T. and EDGAR, T. F., Nonlinear Model Predictive Control of a Fixed-Bed Water-Gas Shift Reactor: An Experimental Study, Computers Chem. Engng., 18, 2, 83-102, 1994.

## APÊNDICE I

### Taxa de Reação para a Oxidação Catalítica do Etanol a Acetaldeído sobre o Catalisador de Fe-Mo

A reação global para a oxidação do etanol a acetaldeído sobre catalisador de Fe-Mo é:



Utiliza-se o ar como fonte de oxigênio, considerando-se a seguinte composição:

Oxigênio ( $\text{O}_2$ )  $\rightarrow$  21%

Nitrogênio ( $\text{N}_2$ )  $\rightarrow$  79%

A conversão com relação ao etanol (reagente limitante) é:

$$X = \frac{n_{\text{ET},0} - n_{\text{ET}}}{n_{\text{ET},0}} \quad (\text{AI.2})$$

Os fluxos molares dos componentes da reação em um ponto do reator onde a conversão de etanol é X, são calculados por:

$$F_{\text{N}_2} = 0.79 F_{\text{AR},0} \quad (\text{AI.3})$$

$$F_{\text{O}_2} = 0.21 F_{\text{AR},0} - \frac{F_{\text{ET},0}}{2} X \quad (\text{AI.4})$$

$$F_{\text{H}_2\text{O}} = F_{\text{ET},0} X \quad (\text{AI.5})$$

$$F_{\text{ET}} = F_{\text{ET},0} - F_{\text{ET},0} X \quad (\text{AI.6})$$

$$F_{AC} = F_{ET,0} X \quad (A1.7)$$

Portanto:

$$\sum_1^5 F_i = F_{ET,0} + F_{AR,0} + \frac{F_{ET,0}}{2} X \quad (A1.8)$$

Definindo-se

$$R = \frac{F_{AR,0}}{F_{ET,0}} \quad (A1.9)$$

Obtem-se:

$$\sum_1^5 F_i = 1 + R + 0.5 X \quad (A1.10)$$

Utilizando as relações:

$$y_i = \frac{F_i}{\sum F_i} \quad (A1.11)$$

$$P_i = y_i P \quad (A1.12)$$

Obtem-se:

$$P_{N2} = \frac{0.79 R P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (A1.13)$$

$$P_{O2} = \frac{(0.21 R - 0.5 X) P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (A1.14)$$

$$P_{H2O} = \frac{X P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (A1.15)$$

$$P_{ET} = \frac{(1 - X) P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (AI.16)$$

$$P_{AC} = \frac{X P}{R + 1 + 0.5 X} \quad (AI.17)$$

Com relação aos parâmetros cinéticos da lei de Arrhenius da equação (III.1), fatores de frequência e energias de ativação, estes são apresentados na Tabela AI.1 a seguir conforme os ajustes obtidos por Domingues (1992).

Parâmetros	$A_i$	$Ea_i$
$K_1$ (NI/min.g <sub>cat</sub> .atm)	$1.702 \times 10^7$	- 8734
$K_2$ (NI/min.g <sub>cat</sub> .atm)	$1.061 \times 10^9$	- 11641
$K_3$ (atm <sup>-1</sup> )	$6.099 \times 10^{-5}$	- 5080
$K_4$ (NI/min.g <sub>cat</sub> .atm)	$1.796 \times 10^{12}$	- 12567

Tabela AI.1 Parâmetros Cinéticos da Taxa de Reação com Catalisador de Fe-Mo.

$$K_i = A_i \exp(Ea_i/T), \quad T = [K] \quad (AI.18)$$

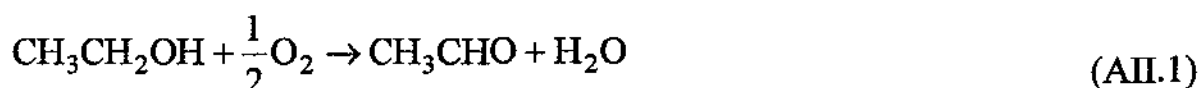
Mais detalhes consultar: Maciel Filho (1985), Domingues (1992), Tresmondi (1995), Azeredo (1996) e Toledo (1997).



## APÊNDICE II

### Taxa de Reação para a Oxidação Catalítica do Etanol a Acetaldeído sobre o Catalisador de Cobre Oxidado

As duas reações para a oxidação do etanol sobre catalisador de cobre oxidado são:



Utiliza-se o ar como fonte de oxigênio, supondo-se a seguinte composição:

Oxigênio ( $\text{O}_2$ )  $\rightarrow$  21%

Nitrogênio ( $\text{N}_2$ )  $\rightarrow$  79%

A conversão global com relação ao etanol (reagente limitante) é:

$$X = \frac{n_{\text{ET},0} - n_{\text{ET}}}{n_{\text{ET},0}} \quad (\text{AII.3})$$

Os fluxos molares dos componentes da reação em um ponto do reator onde a conversão do etanol a acetaldeído é  $X_1$  e a conversão do etanol a gás carbônico é  $X_2$ , são calculados por:

$$F_{\text{N}_2} = 0.79 F_{\text{AR},0} \quad (\text{AII.4})$$

$$F_{\text{O}_2} = 0.21 F_{\text{AR},0} - F_{\text{ET},0} \left( \frac{X_1}{2} + X_2 \right) \quad (\text{AII.5})$$

$$F_{\text{H}_2\text{O}} = F_{\text{ET},0} (X_1 + 3 X_2) \quad (\text{AII.6})$$

$$F_{ET} = F_{ET,0} - F_{ET,0} (X_1 + X_2) \quad (\text{AII.7})$$

$$F_{AC} = F_{ET,0} X_1 \quad (\text{AII.8})$$

$$F_{CO2} = 2 F_{ET,0} X_2 \quad (\text{AII.9})$$

Portanto:

$$\sum_1^5 F_i = F_{ET,0} + F_{AR,0} + \frac{F_{ET,0}}{2} \left( \frac{X_1}{2} + X_2 \right) \quad (\text{AII.10})$$

Definindo-se:

$$R = \frac{F_{AR,0}}{F_{ET,0}} \quad (\text{AII.11})$$

Obtem-se:

$$\sum_1^5 F_i = 1 + R + (0.5 X_1 + X_2) \quad (\text{AII.12})$$

Fazendo uso da expressão do rendimento global,  $\Phi$ , Moura (1984):

$$\Phi = \frac{X_1}{X} \quad (\text{AII.13})$$

onde:

$$\Phi = \frac{1}{X \left( 1 - \frac{K_5}{K_6} \right)} \left[ (1 - X)^{K_5/K_1} - (1 - X) \right] \quad (\text{AII.14})$$

e utilizando as relações:

$$X = X_1 + X_2 \quad (\text{AII.15})$$

$$y_i = \frac{F_i}{\sum F_i} \quad (\text{AII.16})$$

$$P_i = y_i P \quad (\text{AII.17})$$

Obtem-se:

$$P_{N_2} = \frac{0.79 R P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (\text{AII.18})$$

$$P_{O_2} = \frac{(0.21 R - 3 X + 2.5 X \Phi) P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (\text{AII.19})$$

$$P_{H_2O} = \frac{(3 X - 2 X \Phi) P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (\text{AII.20})$$

$$P_{ET} = \frac{(1 - X) P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (\text{AII.21})$$

$$P_{AC} = \frac{X \Phi P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (\text{AII.22})$$

$$P_{CO_2} = \frac{2 X (1 - \Phi) P}{R + 1 + X - 0.5 X \Phi} \quad (\text{AII.23})$$

Com relação aos parâmetros cinéticos da lei de Arrhenius da equação (III.7), fatores de frequência e energias de ativação, estes são apresentados na Tabela AII.1 a seguir conforme os ajustes obtidos por Moura (1984).

Parâmetros	$A_i$	$Ea_i$
$K_1$ (kmol de etanol/m <sup>2</sup> .h.atm)	$8.727 \times 10^{12}$	- 37361
$K_2$ (kmol de etanol/m <sup>2</sup> .h.atm)	$4.537 \times 10^4$	- 15692
$K_3$ (atm <sup>-1</sup> )	2.740	3762
$K_4$ (kmol de etanol/m <sup>2</sup> .h.atm)	$2.504 \times 10^3$	- 7140
$K_5$ (kmol de etanol/m <sup>2</sup> .h.atm)	$1.221 \times 10^{12}$	- 37361

Tabela AII.1 Parâmetros Cinéticos da Taxa de Reação  
com Catalisador de Cobre Oxidado

$$K_i = A_i \exp(Ea_i/R T), \quad T = [K] \quad (\text{AII.24})$$

Mais detalhes consultar Moura (1984).

## Modelos do Reator utilizando a Taxa de Reação com Catalisador de Cobre Oxidado

### Modelo Pseudo-Homogêneo Clássico utilizando $R_{W2}$

As equações adimensionalizadas do modelo do reator catalítico de leito fixo utilizando a equação da taxa de reação  $R_{W2}$  são:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \frac{D_{ef}}{R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X_1}{\partial r} \right] - \frac{G}{\rho_g L} \frac{\partial X_1}{\partial z} + \frac{PM \rho_B \Phi}{\rho_g} R_{W2} \quad (\text{AII.25})$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = \frac{D_{ef}}{R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X_2}{\partial r} \right] - \frac{G}{\rho_g L} \frac{\partial X_2}{\partial z} + \frac{PM \rho_B (1 - \Phi)}{\rho_g} R_{W2} \quad (\text{AII.26})$$

Balanço de Energia:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} = & \frac{\lambda_{ef}}{\rho_g C_p R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{G}{\rho_g L} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\rho_B (-\Delta H_{R1}) \Phi R_{W1}}{\rho_g C_p T_{ref} (R+1)} + \\ & \frac{\rho_B (-\Delta H_{R2}) (1 - \Phi) R_{W2}}{\rho_g C_p T_{ref} (R+1)} \end{aligned} \quad (\text{AII.27})$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{G}{\rho_g L} \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G^2 L}{\rho_g D_p p_{ref} g_c} f \right] \quad (\text{AII.28})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_g V_f) = 0 \quad (\text{AII.29})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_w}{\rho_R C_{PR}} (T(l, z, t) - T_R) \quad (\text{AII.30})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r=0 \quad \frac{\partial X_1}{\partial r} = \frac{\partial X_2}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{AII.31})$$

$$r=1 \quad \frac{\partial X_1}{\partial r} = \frac{\partial X_2}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T(l, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AII.32})$$

$$z=0 \quad X_1 = X_2 = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{AII.33})$$

### Modelo baseado em Jutan et al. (1977) utilizando $R_{W2}$

As equações do reator catalítico de leito fixo utilizando a equação da taxa de reação  $R_{W2}$  são:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \frac{D_{ef}}{\varepsilon R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X_1}{\partial r} \right] - \frac{G}{\varepsilon \rho_f L} \frac{\partial X_1}{\partial z} + \frac{PM \rho_B \Phi}{\varepsilon \rho_f} R_{W2} \quad (\text{AII.34})$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = \frac{D_{ef}}{\varepsilon R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X_2}{\partial r} \right] - \frac{G}{\varepsilon \rho_f L} \frac{\partial X_2}{\partial z} + \frac{PM \rho_B (1 - \Phi)}{\varepsilon \rho_f} R_{W2} \quad (\text{AII.35})$$

Balanço de Energia:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} = & \frac{\lambda_{ef}}{C_m R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{GC_{pf}}{C_m L} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\rho_B (c \Delta H_{R1}) \Phi}{C_m T_{ref}} \frac{R_{W2}}{(R+1)} + \\ & \frac{\rho_B (-\Delta H_{R2}) (1 - \Phi)}{C_m T_{ref}} \frac{R_{W2}}{(R+1)} \end{aligned} \quad (\text{AII.36})$$

onde:  $C_m = \varepsilon (\rho_f C_{pf}) + \rho_B C_{ps}$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{G}{\rho_g L} \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G^2 L}{\rho_g D_p p_{ref} g_c} f \right] \quad (\text{AII.37})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{AII.38})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_w}{\rho_R C_{PR}} (T(l, z, t) - T_R) \quad (\text{AII.39})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X_1}{\partial r} = \frac{\partial X_2}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{AII.40})$$

$$r = 1 \quad \frac{\partial X_1}{\partial r} = \frac{\partial X_2}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T(l, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AII.41})$$

$$z = 0 \quad X_1 = X_2 = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{AII.42})$$

### Modelo de Toledo e Maciel Filho utilizando $R_{w2}$

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \frac{D_{eff}}{R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X_1}{\partial r} \right] - \frac{G_i}{\rho_f L} \frac{\partial X_1}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon)PM\rho_s\Phi}{\varepsilon\rho_f} R_{w2} \quad (\text{AII.43})$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = \frac{D_{eff}}{R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X_2}{\partial r} \right] - \frac{G_i}{\rho_f L} \frac{\partial X_2}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon)PM\rho_s(1-\Phi)}{\varepsilon\rho_f} R_{w2} \quad (\text{AII.44})$$

Balço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_{ef}}{C_m R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{\varepsilon G_i C_{pf}}{C_m L} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon) \rho_s (-\Delta H_{R1}) \Phi}{C_m T_{ref}} \frac{R_{w2}}{(R+1)} + \frac{(1-\varepsilon) \rho_s (-\Delta H_{R2}) (1-\Phi)}{C_m T_{ref}} \frac{R_{w2}}{(R+1)} \quad (\text{AII.45})$$

onde:  $C_m = \varepsilon (\rho_f C_{pf}) + (1 - \varepsilon) (\rho_s C_{ps})$

Balço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{G_i}{\rho_g L} \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G_i^2 L}{\rho_g D_p p_{ref} g_c} f \right] \quad (\text{AII.46})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{AII.47})$$

Balço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_w}{\rho_R C_{PR}} (T(1, z, t) - T_R) \quad (\text{AII.48})$$

com a seguintes condições de contorno:

$$r=0 \quad \frac{\partial X_1}{\partial r} = \frac{\partial X_2}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{AII.49})$$

$$r=1 \quad \frac{\partial X_1}{\partial r} = \frac{\partial X_2}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AII.50})$$

$$z=0 \quad X_1 = X_2 = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{AII.51})$$



onde,  $X_1$  é a conversão do etanol a acetaldeído e  $X_2$  é a conversão do etanol a gás carbônico,  $\Delta H_{R1}$  e  $\Delta H_{R2}$  são as entalpias de reação molar para as reações do etanol a acetaldeído e gás carbônico respectivamente, (kcal/kmol),  $R_{W2}$  é a taxa de reação de oxidação de etanol a acetaldeído sobre catalisador de cobre oxidado expresso nas unidades de (kmol de etanol/m<sup>2</sup>.h), Moura (1984), e as demais variáveis e parâmetros são os mesmos já apresentadas anteriormente.

### Simulação Estacionária e Dinâmica

Nas figuras apresentadas a seguir estão representadas o comportamento estacionário (Figuras AII.1 à AII.6) e o dinâmico (Figuras AII.7 à AII.11) dos modelos descritos anteriormente utilizando a taxa de reação de Moura,  $R_{W2}$ .

Pela observação das Figuras de AII.1 à AII.6 (regime estacionário) apresentadas a seguir este sistema apresenta uma conversão inferior a taxa de reação de Maciel Filho (1985), mais no geral as mesmas conclusões obtidas no Capítulo III para a taxa de reação de Maciel Filho (1985) são válidas para esta situação.

Com relação as simulações dinâmicas pode-se observar pelas Figuras de AII.7 à AII.11, comportamentos semelhante aos do Capítulo IV quando se utiliza a taxa de reação de Maciel Filho (1985). No entanto, deve-se ressaltar que houve necessidade de se utilizar o método da colocação ortogonal em elementos finitos com o integrador DASSL com a restrição de não permitir valores negativos para as variáveis dependentes neste caso, pois utilizando colocação dupla com o integrador LSODAR o sistema apresentou oscilações, com inclusive valores negativos, Figura AII.10. Estes problemas relacionados com a implementação do método de colocação ortogonal são apresentados no Capítulo III e Apêndice V.

Mais detalhes sobre este sistema e sobre os valores de projeto e operação do reator catalítico de leito fixo consultar Moura (1984) e o Apêndice III.

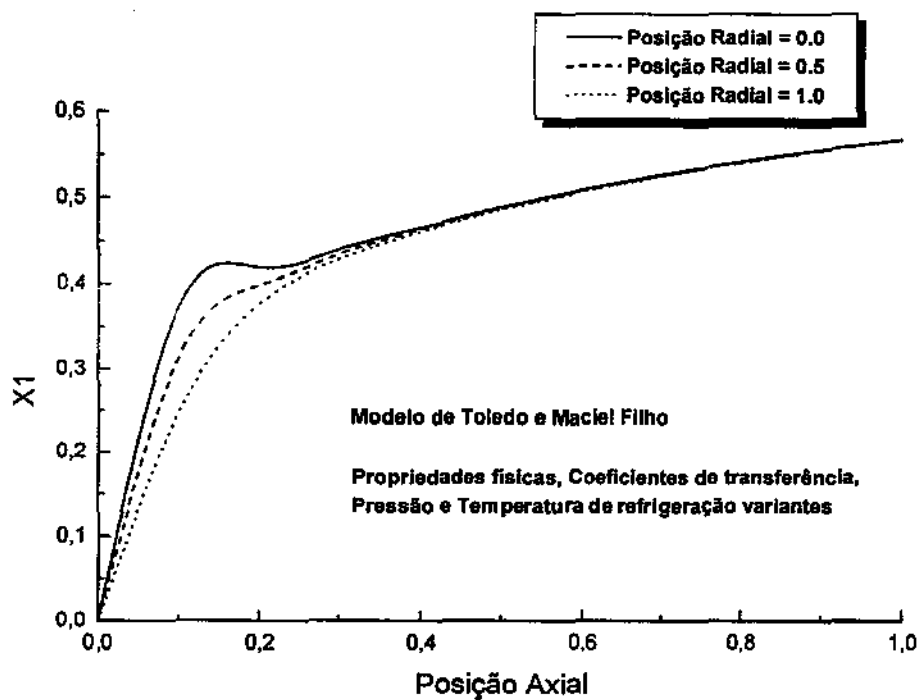


Figura AII.1 - Perfil Estacionário da Conversão do Reator

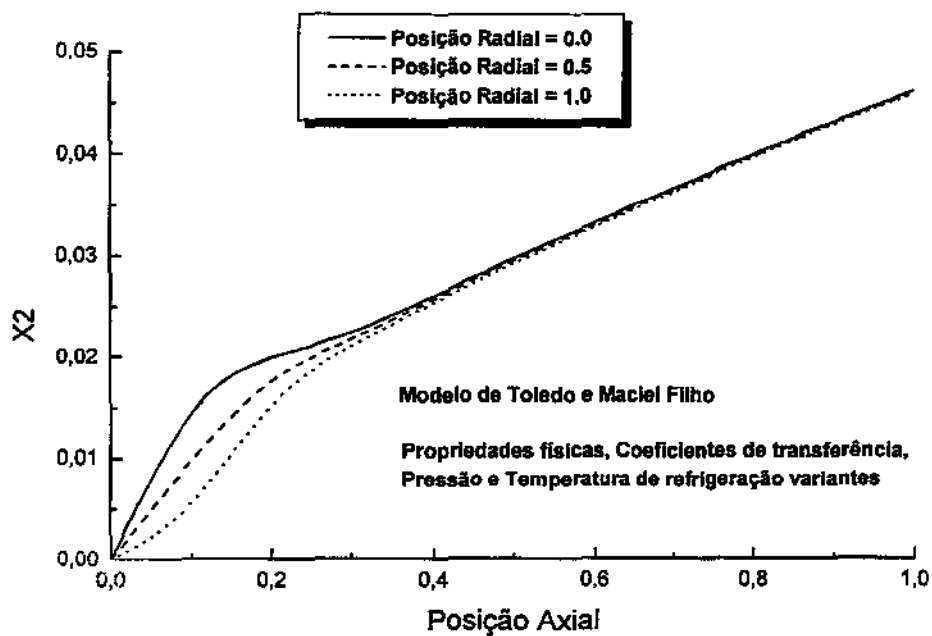


Figura AII.2 - Perfil Estacionário da Conversão do Reator

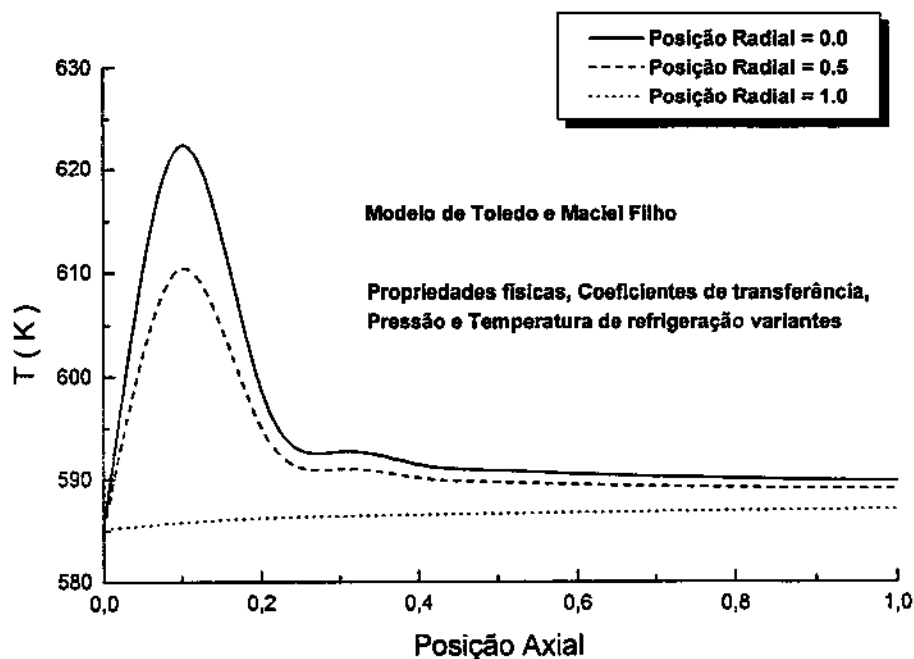


Figura AII.3 – Perfil Estacionário da Temperatura do Reator

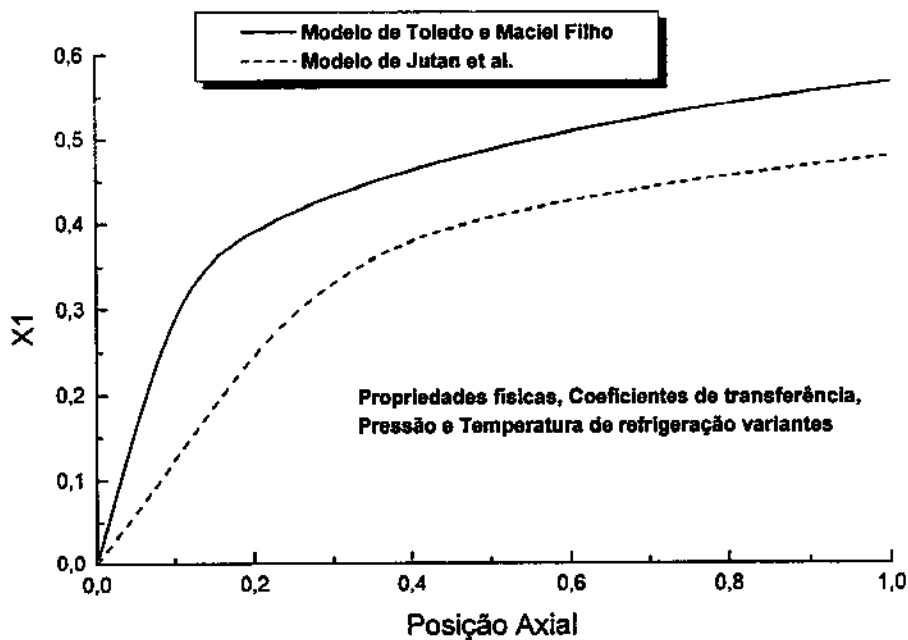


Figura AII.4 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

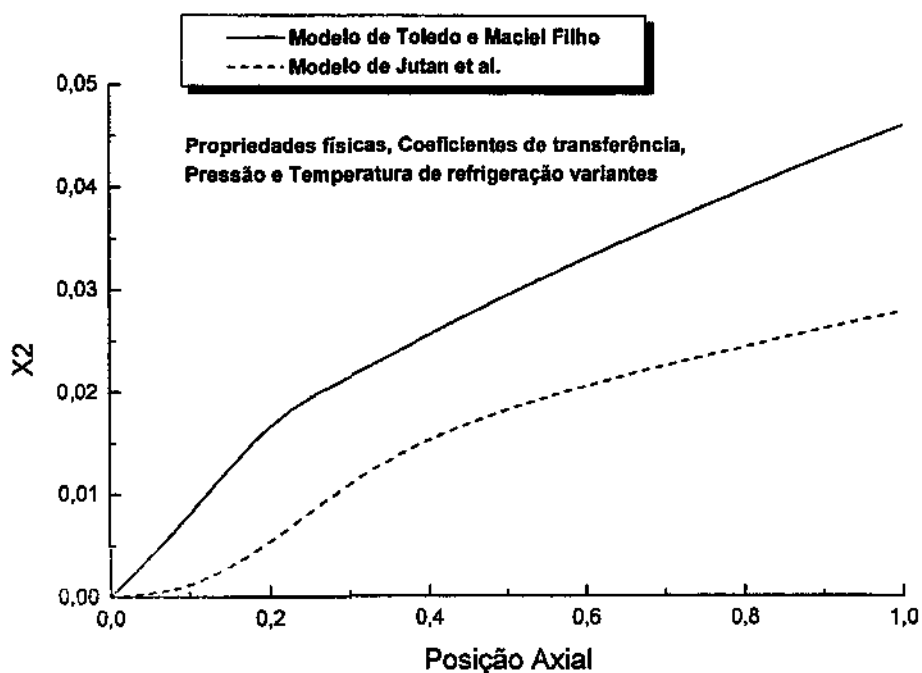


Figura AII.5 - Perfil Estacionário da Conversão Radial Média do Reator

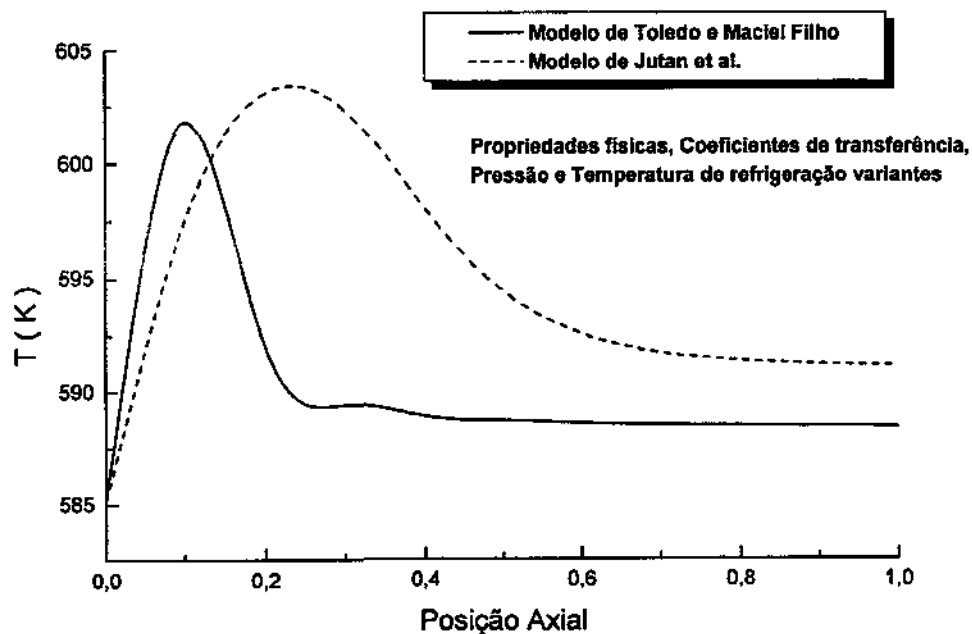


Figura AII.6 - Perfil Estacionário da Temperatura Radial Média do Reator

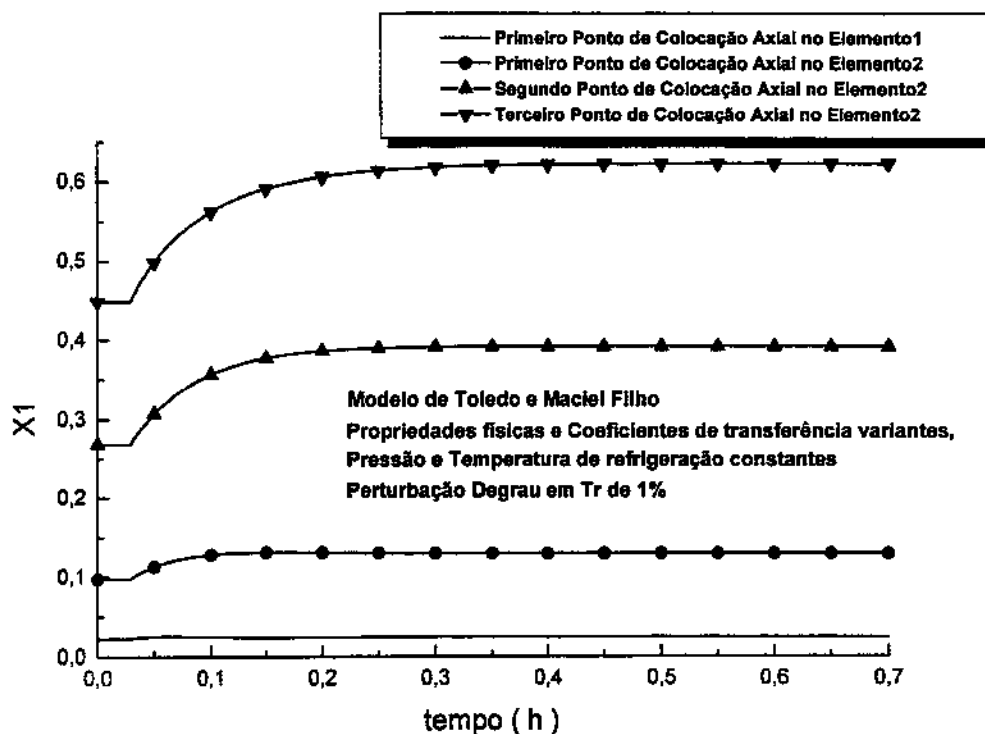


Figura AII.7 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

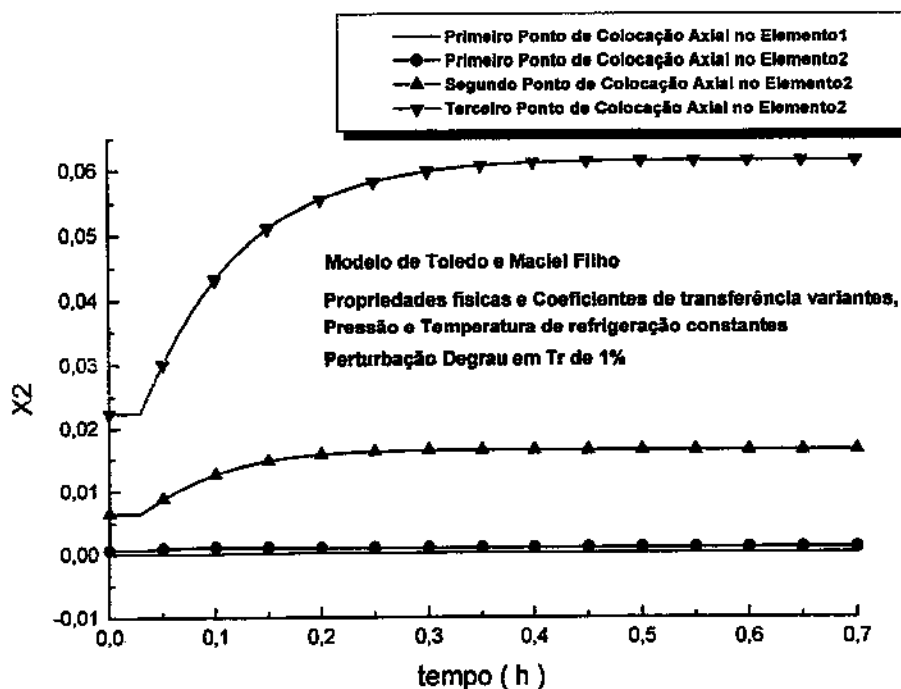


Figura AII.8 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

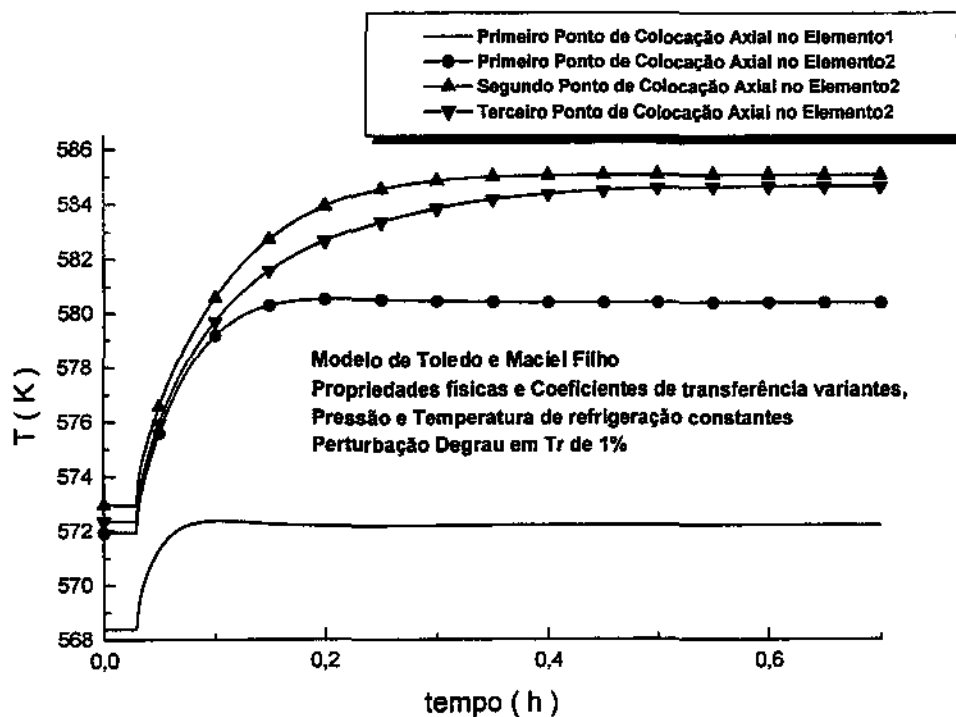


Figura AII.9 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

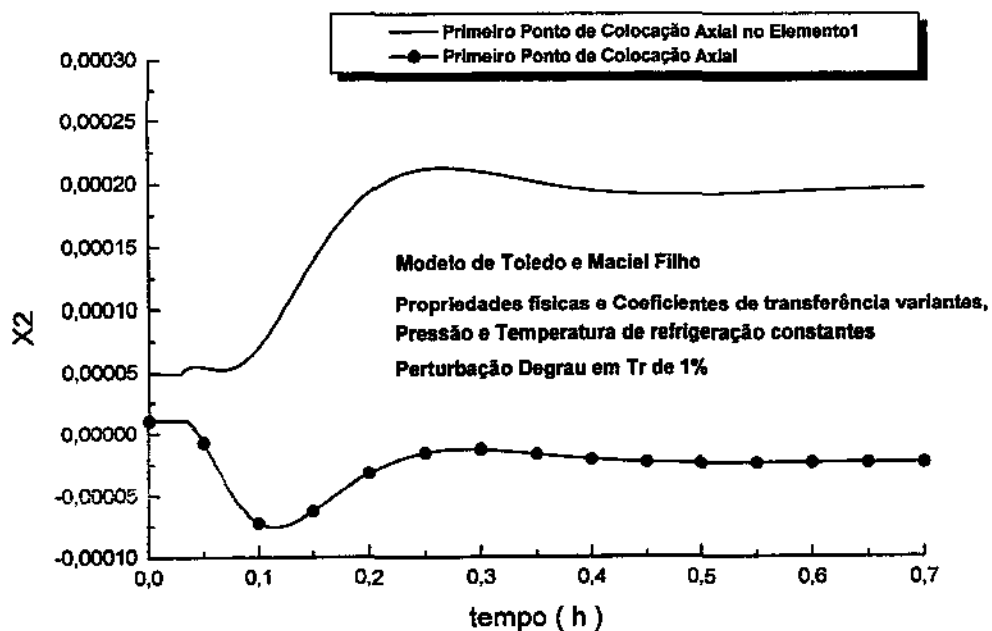


Figura AII.10 - Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

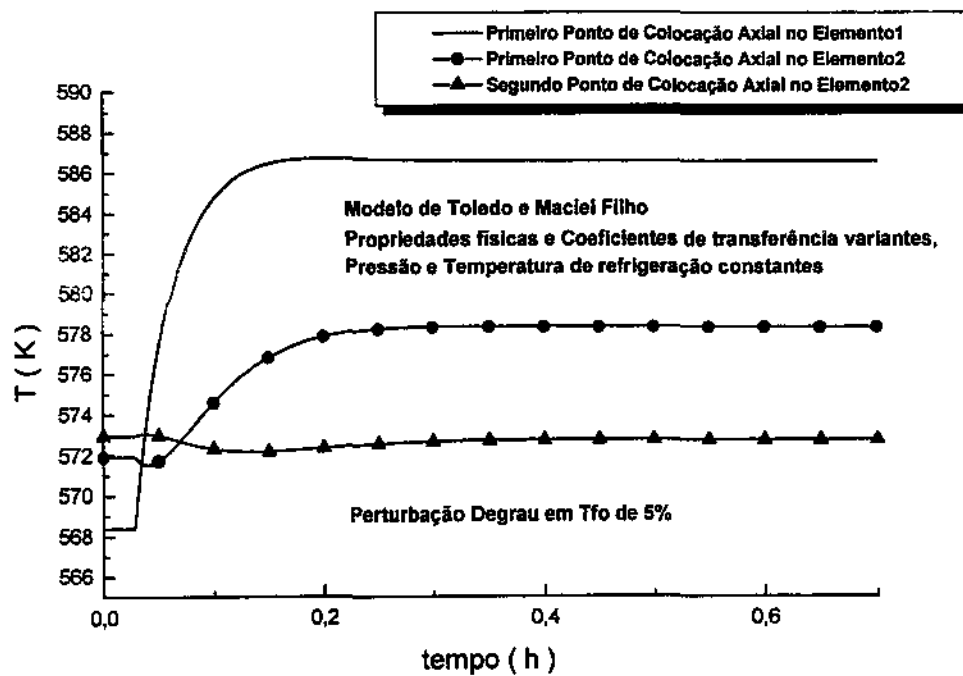


Figura AII.11 - Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

## APÊNDICE III

### Propriedades Físicas, Coeficientes de Transferência, Parâmetros Operacionais e de Projeto do Reator Catalítico de Leito Fixo

É muito comum na literatura não considerar a variação das propriedades físicas e coeficientes de transferência ao longo do comprimento do reator. No entanto, não considerar esta variação pode levar à diferenças significantes nas predições, McGreavy e Maciel Filho (1988), Maciel Filho (1989).

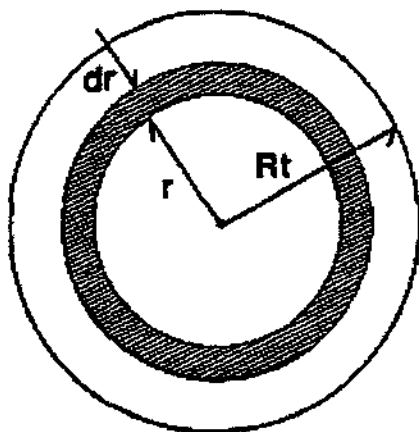
As fontes de dados e correlações para o cálculo dos coeficientes de transferência, propriedades das substâncias puras, de mistura, dos catalisadores e do fluido refrigerante foram Moura (1984), Maciel Filho (1985), Froment e Bischoff (1990), Reid, Prausnitz e Poling (1987), Domingues (1992), Tresmondi (1995) e Azeredo (1996).

#### Propriedade Radial Média para uma determinada Posição Axial

Para uma grandeza qualquer, por exemplo  $T$ , definida e contínua numa superfície  $S$ , pode-se fazer um cálculo da temperatura média,  $T_{med}$ , em  $S$  pela integração, Domingues (1992):

$$T_{med} = \frac{1}{S} \int_0^S T \, ds \quad (AIII.1)$$

Para uma superfície circular e  $T = T(r)$ , ou seja, a grandeza  $T$  é só função do raio, têm-se:





$$S = \pi R_t^2 \quad \text{Secção Transversal} \quad (\text{AIII.2})$$

$$dS = 2 \pi r dr \quad \text{Elemento de Área} \quad (\text{AIII.3})$$

$$T_{\text{med}} = \frac{1}{\pi R_t^2} \int_0^{R_t} T 2 \pi r dr \quad (\text{AIII.4})$$

Usando uma variável adimensional para o raio,  $x = \frac{r}{R_t}$ , resulta:

$$T_{\text{med}} = \frac{1}{R_t^2} \int_0^1 T 2 (x R_t) d(x R_t) \quad (\text{AIII.5})$$

ou finalmente

$$T_{\text{med}} = \int_0^1 T d(x^2) \quad (\text{AIII.6})$$

Na aplicação do método da colocação ortogonal trabalhou-se com o sistema de equações diferenciais adimensionalizadas, e empregou-se uma variável radial adimensionalizada quadrática, definida por:

$$u = x^2 = \frac{r^2}{R_t^2} \quad (\text{AIII.7})$$

com isso, o cálculo da grandeza média  $T_{\text{med}}$  fica:

$$T_{\text{med}} = \int_0^1 T du \quad (\text{AIII.8})$$

A qual pode ser determinada utilizando os programas de quadratura apresentados por Villadsen e Michelsen (1978).

Portanto, qualquer variável radial média para uma determinada posição axial do reator catalítico de leito fixo pode ser calculado por:

$$[\ ]_{med} = \int_0^1 [\ ] du \quad (AIII.9)$$

onde  $[\ ]$  representa uma variável qualquer.

### **Peso Molecular da Mistura**

O peso molecular da mistura é dado por:

$$PM_g = \sum_{i=1}^n y_{média,i} PM_i \quad (AIII.10)$$

onde:

$PM_g$  = peso molecular radial médio do gás, kg/kmol;

$PM_i$  = peso molecular da substância  $i$ , kg/kmol;

$y_{média,i}$  = fração molar radial média da substância  $i$ .

### **Viscosidade da Mistura**

Para o cálculo da viscosidade de mistura utilizou-se o método interpolativo de Wilke:

$$\mu_g = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \mu_i}{\sum_{j=1}^n y_j \phi_{ij}} \quad (AIII.11)$$

$$\phi_{ij} = \frac{\left[ 1 + \left( \frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} (PM_j PM_i)^{1/4} \right]^2}{\left[ 8 \left( 1 + \frac{PM_i}{PM_j} \right) \right]^{1/2}} \quad (AIII.12)$$

$$\phi_{ji} = \phi_{ij} \left( \frac{\mu_j}{\mu_i} \right) \left( \frac{PM_i}{PM_j} \right) \quad (AIII.13)$$

$$\mu_i = f(T) \quad (\text{AIII.14})$$

onde:

$\mu_g$  = viscosidade dinâmica do gás reagente, kg/(m.h);

$\mu_i$  = viscosidade dinâmica da substância i, kg/(m.h);

$PM_i$  = peso molecular da substância i, kg/kmol;

$y_i$  = fração molar da substância i.

### Condutividade Térmica da Mistura

Para o cálculo da condutividade térmica de mistura utilizou-se do método interpolativo de Wassiljewa, parecido na forma com o método de Wilke:

$$\lambda_g = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^n y_j A_{ij}} \quad (\text{AIII.15})$$

$$A_{ij} = \frac{\left[ 1 + \left( \frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} (PM_j PM_i)^{1/4} \right]^2}{\left[ 8 \left( 1 + \frac{PM_i}{PM_j} \right) \right]^{1/2}} \quad (\text{AIII.16})$$

$$A_{ji} = A_{ij} \left( \frac{\mu_j}{\mu_i} \right) \left( \frac{PM_i}{PM_j} \right) \quad (\text{AIII.17})$$

$$\lambda_i = f(T) \quad (\text{AIII.18})$$

onde:

$\lambda_g$  = viscosidade dinâmica do gás reagente, kg/(m.h);

$\lambda_i$  = viscosidade dinâmica da substância i, kg/(m.h);

$PM_i$  = peso molecular da substância i, kg/kmol;

$y_i$  = fração molar da substância i.

### **Calor Específico da Mistura**

O calor específico molar da mistura é dado por:

$$C_{p_g} = \sum_{i=1}^n y_i C_{p_i} \quad (\text{AIII.19})$$

$$C_{p_i} = f(T) \quad (\text{AIII.20})$$

onde:

$C_{p_g}$  = calor específico molar do gás, kcal/(kmol.K);

$C_{p_i}$  = calor específico molar da substância i, kcal/(kmol.K);

$y_i$  = fração molar da substância i.

### **Entalpia de Reação**

A entalpia de reação padrão é dada por:

$$\Delta H_R^{298.15K} = \sum_{i=1}^n \nu_i \Delta H_{\text{formação}_i} \quad (\text{AIII.21})$$

A correção de  $\Delta H_R$  com a temperatura é feita através dos calores específicos molares, de acordo com:

$$\Delta H_R = \Delta H_R^{298.15K} + \sum_{i=1}^5 \nu_i \int_{298.15K}^T C_{p_i} dT \quad (\text{AIII.22})$$

$$C_{p_i} = f(T) \quad (\text{AIII.23})$$

O gás tendo sido considerado ideal, a entalpia de reação é invariante com a pressão.

onde:

$\Delta H_R$  = entalpia de reação, kcal/kmol;

$\Delta H_R^{298.15\text{ K}}$  = entalpia de reação padrão, kcal/kmol;

$\Delta H_{\text{formação } i}$  = entalpia de formação da espécie  $i$  pura, kcal/kmol;

$v_i$  = coeficiente estequiométrico da substância  $i$ ;

$C_{p_i}$  = calor específico molar da substância  $i$ , kcal/(kmol.K ).

### **Densidade da Mistura**

Utilizando a hipótese de gás ideal:

$$P_{\text{média}} V_g = n_{\text{total}} R T_{\text{média}} = \frac{m_{\text{total}}}{PM_g} R T_{\text{média}} \quad (\text{AIII.24})$$

Portanto:

$$\rho_g = \frac{m_{\text{total}}}{V_g} = \frac{P_{\text{média}} PM_g}{R T_{\text{média}}} \quad (\text{AIII.25})$$

onde:

$\rho_g$  = massa específica radial média do gás reagente, kg/m<sup>3</sup>;

$m_{\text{total}}$  = massa total do gás, kg;

$n_{\text{total}}$  = número total de moles do gás, kmol;

$PM_g$  = peso molecular radial médio da mistura, kg/kmol;

$P_{\text{média}}$  = pressão radial média total do gás, atm;

$R$  = constante universal dos gases, (atm.m<sup>3</sup>)/(kmol.K);

$T_{\text{média}}$  = temperatura radial média do gás, K;

$V_g$  = volume de gás, m<sup>3</sup>.

### **Difusividade Efetiva Radial**

Nos processos catalíticos, há fatores que dificultam a análise da transferência de massa em termos de difusividade efetiva. Froment e Bischoff (1990) recomendam que o valor do número de Peclet mássico radial,  $N_{pe_{mr}}$ , esteja entre 8 e 10. Fixou-se o valor 9 e usou-se a correlação com a relação de  $D_p/D_t$  como segue:

$$\text{NPe}_{\text{mr}} = 9.0 \left[ 1 + 19.4 \left( \frac{D_p}{D_t} \right)^2 \right] \quad (\text{AIII.26})$$

como:

$$\text{NPe}_{\text{mr}} = \frac{GM D_p}{\rho_g D_{\text{efr}}} \quad (\text{AIII.27})$$

assim:

$$D_{\text{efr}} = \frac{GM D_p}{\rho_g 9.0 \left[ 1 + 19.4 \left( \frac{D_p}{D_t} \right)^2 \right]} \quad (\text{AIII.28})$$

onde:

$D_{\text{efr}}$  = difusividade efetiva radial,  $\text{m}^2/\text{h}$ ;

$\rho_g$  = massa específica radial média do gás reagente,  $\text{kg}/\text{m}^3$ ;

$D_p$  = diâmetro da partícula de catalisador, m;

$D_t$  = diâmetro interno do tubo do reator, m;

$GM$  ( $G, G_i$ ) = velocidade de fluxo mássico do gás,  $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$ .

### **Condutividade Efetiva Radial**

A transferência de energia no leito fixo de partículas de catalisadores não é um processo trivial porque envolve muitos mecanismos além de uma estrutura geométrica complexa. Portanto, é conveniente usar a condutividade térmica efetiva,  $\lambda_{\text{efr}}$ , que engloba todas as contribuições para o transporte de energia exceto convecção por “plug-flow”.

Froment e Bischoff (1990) propuseram o uso de duas contribuições, estática e dinâmica, para o cálculo da condutividade térmica efetiva radial da seguinte forma:

$$\lambda_{\text{efr}} = \lambda_{\text{efr}}^{\text{est}} + \lambda_{\text{efr}}^{\text{din}} \quad (\text{AIII.29})$$

A contribuição estática resulta de mecanismos de transporte de calor por irradiação e condução. Mecanismos estes que ocorrem na ausência de fluxo.

O termo estático é calculado da seguinte maneira:

$$\frac{\lambda_{\text{eff}}^{\text{est}}}{\lambda_g} = \varepsilon \left( 1 + \beta \frac{D_p \alpha_{rv}}{\lambda_g} \right) + \frac{\beta (1 - \varepsilon)}{\frac{1}{\frac{1}{\phi} + \frac{\alpha_{rs} D_p}{\lambda_g}} + \gamma \frac{\lambda_g}{\lambda_s}} \quad (\text{AIII.30})$$

$$\alpha_{rv} = \frac{0.227 \times 10^{-3}}{1 + \frac{\varepsilon}{2(1 - \varepsilon)} \frac{1 - p}{p}} \left( \frac{T + 273.15}{100} \right)^3 \quad (\text{AIII.31})$$

$$\alpha_{rs} = 0.227 \times 10^{-3} \frac{p}{2 - p} \left( \frac{T + 273.15}{100} \right)^3 \quad (\text{AIII.32})$$

onde:

$\lambda_{\text{eff}}^{\text{est}}, \lambda_g, \lambda_s$  = condutividade estática, do fluido e do sólido, kcal/(m.h.K);

$\varepsilon$  = porosidade;

$D_p$  = diâmetro da partícula de catalisador, m;

$\beta$  = coeficiente que depende da geometria da partícula e da densidade do leito, compreendido entre 0.9 e 1.0;

$\alpha_{rv}$  = coeficiente de radiação entre vazios, kcal/(m<sup>2</sup>.h.K);

$\alpha_{rs}$  = coeficiente de radiação entre partículas, kcal/(m<sup>2</sup>.h.K);

$p$  = emissividade térmica do sólido;

$\gamma = \frac{2}{3}$ ;

$\phi$  = depende da densidade do leito, Froment e Bischoff (1990), Domingues (1992).

A contribuição dinâmica surge exclusivamente do transporte no fluido e é a manifestação de transporte energético que corresponde ao transporte de massa por mistura descrito pela difusividade efetiva radial. Quando a analogia entre transferência de massa e calor é completa, a relação abaixo pode ser escrita:

$$\lambda_{\text{eff}}^{\text{din}} = \lambda_g \psi N_{\text{Prg}} N_{\text{Reg}} \quad (\text{AIII.33})$$

$$\psi = \frac{0.14}{1 + 46 \left( \frac{D_p}{D_t} \right)^2} \quad (\text{AIII.34})$$

$$N_{\text{Reg}} = \frac{GM D_p}{\mu_g} \quad (\text{AIII.35})$$

$$N_{\text{Prg}} = \frac{Cp_g \mu_g}{\lambda_g} \quad (\text{AIII.36})$$

onde:

$\lambda_{\text{eff}}^{\text{din}}, \lambda_g$  = condutividade dinâmica e do fluido, kcal/(m.h.K);

$\mu_g$  = viscosidade dinâmica do gás reagente, kg/(m.h);

$Cp_g$  = calor específico mássico do gás, kcal/(kg.K);

$D_p$  = diâmetro da partícula de catalisador, m;

$D_t$  = diâmetro interno do tubo do reator, m;

$GM (G, G_i)$  = velocidade de fluxo mássico do gás, kg/(m<sup>2</sup>.h).

### **Coefficiente de Convecção na Parede Interna**

Com relação ao coeficiente de convecção interno fez-se uso das correlações utilizadas por Domingues (1992):

$$\text{Para } 0.003 < \frac{D_p}{D_t} < 0.03 \quad \text{com } H = \frac{D_p}{D_t}:$$

$$\frac{\alpha_{wi} D_t}{\lambda_g} = f^* D_t^{0.17} \left( \frac{D_t GM}{\mu_g} \right)^{0.83} N_{\text{Prg}} \quad (\text{AIII.37})$$

$$N_{\text{Prg}} = \frac{Cp_g \mu_g}{\lambda_g} \quad (\text{AIII.38})$$



$$f^* = 0.116439 + 24.74203 H - 1452.025 H^2 + 24074 H^3 - 0.00013 H^{-1} \quad (\text{AIII.39})$$

Para  $\frac{D_p}{D_t} \geq 0.03$ :

$$N_{Nup} = 0.03455 N_{Rep} + 5.80664 \quad (\text{AIII.40})$$

$$N_{Nup} = \frac{\alpha_{wi} D_p}{\lambda_g} \quad (\text{AIII.41})$$

$$N_{Rep} = \frac{D_p GM}{\mu_g} \quad (\text{AIII.42})$$

onde:

$\alpha_{wi}$  = coeficiente de filme na parede interna, kcal/(m<sup>2</sup>.h.K);

$\lambda_g$  = condutividade do fluido, kcal/(m.h.K);

$\mu_g$  = viscosidade dinâmica do gás reagente, kg/(m.h);

$C_{pg}$  = calor específico mássico do gás, kcal/(kg.K);

$D_p$  = diâmetro da partícula de catalisador, m;

$D_t$  = diâmetro interno do tubo do reator, m;

$GM$  ( $G$ ,  $G_i$ ) = velocidade de fluxo mássico do gás, kg/(m<sup>2</sup>.h).

### Propriedades do Catalisador

#### Catalisador de Fe-Mo

$$C_{ps} = 0.15 \text{ kcal/kgcat.K}$$

$$\rho_s = 3857 \text{ kgcat/m}^3;$$

$$\rho_B = 2314 \text{ kgcat/m}^3;$$

#### Catalisador de Cobre-Oxidado

$$C_{ps} = 0.0924 \text{ kcal/kgcat.K}$$

$$\rho_s = 8920 \text{ kgcat/m}^3;$$

$$\rho_B = 5260 \text{ kgcat/m}^3;$$

onde:

$C_{ps}$  = calor específico do catalisador, (kcal/kgcat.K)

$\rho_s$  = densidade do catalisador, (kgcat/m<sup>3</sup>);

$\rho_B$  = densidade aparente do leito, (kgcat/m<sup>3</sup>);

### **Parâmetros Operacionais e de Projeto do Reator Catalítico de Leito Fixo**

Valores utilizados nas simulações em malha aberta e fechada neste trabalho.

$T_{fo} = T_{ro} = T_r = 427.15K$  à  $445.15K$  e de  $565.15K$  à  $585.15K$ ;

$R = 20, 25$  e  $28$ ;

$GM (G, G_i) = 3000kg/m^2.h$  à  $7500kg/m^2.h$ ;

$u_R = 0.7 m/h$  à  $3.0 m/h$ ;

$p_o = 1 atm$ ;

$D_t = 0.017m$  e  $0.023m$ ;

$D_p = 0.002m$ ;

$L = 1m$  e  $2m$ ;

$L_1 = 0.05$ ;

$L_2 = 0.95$ ;

$N_1 = 1$ ;

$N_2 = 5$ ;

$\epsilon = 0.4$ .

## APÊNDICE IV

### Demonstração Matemática da Técnica de Redução Adotada por Maciel Filho (1989)

Neste apêndice é demonstrado que utilizando o teorema da média, equação (AIV.1), com uma equação quadrática para a temperatura do reator em função da temperatura radial média, equação (AIV.2), chega-se ao mesmo número de Biot modificado que aplicando a técnica de redução de Hermite, só que com maior dificuldade matemática e admitindo hipóteses físicas para o fenômeno de transferência de calor, McGreavy e Naim (1977), Maciel Filho (1989), Stremel et al. (1997) e Toledo e Maciel Filho (1996b, 1996c, 1997a, 1997b, 1998c).

$$[\ ]_m = 2 \int_0^1 [\ ] r \, dr \quad (\text{AIV.1})$$

$$T(r) = T_m b - b r^2 \quad (\text{AIV.2})$$

onde  $T_m$  é a temperatura radial média do reator.

Para iniciar a demonstração, utiliza-se somente a definição da temperatura radial média:

$$T_m = 2 \int_0^1 T(r) r \, dr \quad (\text{AIV.3})$$

resolvendo a integral da equação (AIV.3) por partes, temos o seguinte desenvolvimento matemático:

$$\int v \, du = v u - \int u \, dv \quad (\text{AIV.4})$$

$$du = r \, dr \Rightarrow u = \frac{r^2}{2} \quad (\text{AIV.5})$$

$$v = T(r) \Rightarrow dv = \left( \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right) dr \quad (\text{AIV.6})$$

$$\int_0^1 T(r) r \, dr = T(r) \frac{r^2}{2} \Big|_0^1 - \int_0^1 \frac{r^2}{2} \left( \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right) dr \quad (\text{AIV.7})$$

ou

$$\int_0^1 T(r) r \, dr = \frac{T(r=1)}{2} - \frac{1}{2} \int_0^1 r^2 \left( \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right) dr \quad (\text{AIV.8})$$

Multiplicando a equação (AIV.8) por 2, temos que:

$$2 \int_0^1 T(r) r \, dr = T(r=1) - \int_0^1 r^2 \left( \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right) dr \quad (\text{AIV.9})$$

Novamente resolvendo a integral do lado direito da equação (AIV.9) por partes:

$$\int v \, du = v u - \int u \, dv \quad (\text{AIV.10})$$

$$du = r^2 \, dr \Rightarrow u = \frac{r^3}{3} \quad (\text{AIV.11})$$

$$v = \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Rightarrow dv = \left( \frac{\partial^2 T(r)}{\partial r^2} \right) dr \quad (\text{AIV.12})$$

$$\int_0^1 r^2 \left( \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right) dr = \frac{r^3}{3} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_0^1 - \int_0^1 \frac{r^3}{3} \left( \frac{\partial^2 T(r)}{\partial r^2} \right) dr \quad (\text{AIV.13})$$

ou

$$\int_0^1 r^2 \left( \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right) dr = \frac{1}{3} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} - \int_0^1 \frac{r^3}{3} \left( \frac{\partial^2 T(r)}{\partial r^2} \right) dr \quad (\text{AIV.14})$$

Portanto, a equação (AIV.9) fica da seguinte forma:

$$2 \int_0^1 T(r) r \, dr = T(r=1) - \frac{1}{3} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} + \int_0^1 \frac{r^3}{3} \left( \frac{\partial^2 T(r)}{\partial r^2} \right) dr \quad (\text{AIV.15})$$

Substituindo a equação (AIV.15) em (AIV.3), temos uma nova expressão para a temperatura radial média após duas integração por partes da seguinte forma:

$$T_m = 2 \int_0^1 T(r) r \, dr = T(r=1) - \frac{1}{3} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} + \int_0^1 \frac{r^3}{3} \left( \frac{\partial^2 T(r)}{\partial r^2} \right) dr \quad (\text{AIV.16})$$

A equação (AIV.16) tem um termo matemático, a integral do lado esquerdo da equação, que precisaria ser determinado para poder expressar a temperatura radial média em função de valores conhecidos. Portanto, somente utilizando o teorema da média não se consegue resolver o problema de forma satisfatória. Este impasse é resolvido utilizando conjuntamente o teorema da média, equação (AIV.1), com a equação da temperatura do reator em função da temperatura radial média, equação (AIV.2).

Então, derivando em relação a variável radial a equação quadrática para a temperatura do reator temos que:

$$T(r) = T_m b - b r^2 \quad (\text{AIV.17})$$

$$\frac{\partial T(r)}{\partial r} = -2 b r \quad (\text{AIV.18})$$

$$\frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} = -2 b \Rightarrow b = -\frac{1}{2} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} \quad (\text{AIV.19})$$

Substituindo a equação (AIV.17) na definição da temperatura radial média:

$$T_m = 2 \int_0^1 T(r) r \, dr \quad (\text{AIV.20})$$

$$T_m = 2 \int_0^1 (T_m b - b r^2) r \, dr = 2 \int_0^1 T_m b r \, dr - 2 \int_0^1 b r^2 r \, dr =$$

$$2 T_m b \int_0^1 r dr - 2 b \int_0^1 r^3 dr = 2 T_m b \left. \frac{r^2}{2} \right|_0^1 - 2 b \left. \frac{r^4}{4} \right|_0^1 \quad (\text{AIV.21})$$

Logo:

$$T_m = T_m b - \frac{b}{2} \quad (\text{AIV.22})$$

Igualando as equações (AIV.17) e (AIV.22):

$$T_m b = T_m + \frac{b}{2} = T(r) + b r^2 \quad (\text{AIV.23})$$

ou

$$T_m = T(r) + b r^2 - \frac{b}{2} \quad (\text{AIV.24})$$

Utilizando a equação (AIV.24) para  $r = 1$ :

$$T_m - T(r=1) = b - \frac{b}{2} = \frac{b}{2} \quad (\text{AIV.25})$$

Substituindo a equação (AIV.19) na (AIV.25), temos a expressão matemática para a temperatura radial média na forma desejada:

$$T_m - T(r=1) = -\frac{1}{4} \frac{\partial T}{\partial r} \bigg|_{r=1} \quad (\text{AIV.26})$$

Portanto, há necessidade de manipulação matemática e suposição física do fenômeno para resolver o problema de transferência de calor apresentado.

Agora retornando a equação (AIV.15) apenas para determinar o valor da integral, temos que:

$$T_m = T(r=1) - \frac{1}{3} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \bigg|_{r=1} + \int_0^1 \frac{r^3}{3} \left( \frac{\partial^2 T(r)}{\partial r^2} \right) dr \quad (\text{AIV.27})$$

Então:

$$\int_0^1 \frac{r^3}{3} \left( \frac{\partial^2 T(r)}{\partial r^2} \right) dr = (T_m - T(r=1)) + \frac{1}{3} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} \quad (\text{AIV.28})$$

Substituindo a equação (AIV.26) em (AIV.28), temos que:

$$\int_0^1 \frac{r^3}{3} \left( \frac{\partial^2 T(r)}{\partial r^2} \right) dr = -\frac{1}{4} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} + \frac{1}{3} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} = \frac{1}{12} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} \quad (\text{AIV.29})$$

Portanto, a equação (AIV.27) fica da seguinte forma:

$$T_m = T(r=1) - \frac{1}{3} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} + \frac{1}{12} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} \quad (\text{AIV.30})$$

ou

$$T_m = T(r=1) - \frac{1}{4} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \Big|_{r=1} \quad (\text{AIV.31})$$

Então, a equação (AIV.31) é uma nova maneira de se escrever uma expressão matemática para a temperatura radial média, onde está embutido nesta dedução a suposição de um perfil quadrático para a temperatura radial média do reator.

Seguindo com o desenvolvimento matemático, defini-se um número de Biot da parede global como:

$$B_{ihm} = \frac{B_{ih} (T(r=1) - T_R)}{(T_m - T_R)} \quad (\text{AIV.32})$$

Isolando  $T_R$  em termos de  $T_m$  e  $B_{ihm}$ :

$$T_R = \frac{B_{ihm} T_m - B_{ih} T(r=1)}{B_{ihm} - B_{ih}} \quad (\text{AIV.33})$$

Utilizando a condição de contorno para a temperatura na parede do reator catalítico de leito fixo:

$$\left. \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right|_{r=1} = -B_{ih} (T(r=1) - T_R) \quad (\text{AIV.34})$$

Substituindo a equação (AIV.33) na (AIV.34):

$$\left. \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right|_{r=1} = -B_{ih} \left[ T(r=1) - \left( \frac{B_{ihm} T_m - B_{ih} T(r=1)}{B_{ihm} - B_{ih}} \right) \right] \quad (\text{AIV.35})$$

ou

$$\left. \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right|_{r=1} = \frac{B_{ihm} B_{ih}}{B_{ih} - B_{ihm}} (T(r=1) - T_m) \quad (\text{AIV.36})$$

Substituindo a equação (AIV.31) na (AIV.36), temos uma nova expressão de  $T_m$  da seguinte forma:

$$T_m = T(r=1) - \frac{1}{4} \left[ \frac{B_{ihm} B_{ih}}{B_{ih} - B_{ihm}} (T(r=1) - T_m) \right] \quad (\text{AIV.37})$$

Da equação (AIV.37) temos que:

$$(4 B_{ih} - 4 B_{ihm} - B_{ih} B_{ihm}) T_m = (4 B_{ih} - 4 B_{ihm} - B_{ih} B_{ihm}) T(r=1) \quad (\text{AIV.38})$$

Como:

$$T_m \neq T(r=1) \neq 0 \quad (\text{AIV.39})$$

Logo:

$$4 B_{ih} - 4 B_{ihm} - B_{ih} B_{ihm} = 0 \quad (\text{AIV.40})$$



Então:

$$B_{ihm} = \frac{4 B_{ih}}{B_{ih} + 4} \quad (\text{AIV.41})$$

onde o número de Biot da parede global,  $B_{ihm}$ , dado pela equação anterior, é o mesmo número de Biot modificado gerado pela técnica de redução de Hermite.

Portanto, este desenvolvimento matemático demonstra a facilidade da técnica de Hermite em relação a utilizada neste apêndice, Maciel Filho (1989).

Também é possível chegar ao mesmo número de Biot, equação (AIV.41), sem necessitar definir um número de Biot global da parede,  $B_{ihm}$ , equação (AIV.32), simplesmente utilizando as equações (AIV.31) e (AIV.34). Portanto, combinando estas equações, tem-se o seguinte desenvolvimento matemático:

$$T_m = T(r=1) - \frac{1}{4} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \bigg|_{r=1} \quad (\text{AIV.42})$$

$$\frac{\partial T(r)}{\partial r} \bigg|_{r=1} = -B_{ih} (T(r=1) - T_R) \quad (\text{AIV.43})$$

Substituindo (AIV.42) em (AIV.43):

$$\frac{\partial T(r)}{\partial r} \bigg|_{r=1} = -B_{ih} \left( T_m + \frac{1}{4} \frac{\partial T(r)}{\partial r} \bigg|_{r=1} - T_R \right) \quad (\text{AIV.44})$$

Portanto:

$$\frac{\partial T(r)}{\partial r} \bigg|_{r=1} = \frac{B_{ih}}{4 + B_{ih}} (T_R - T_m) \quad (\text{AIV.45})$$

ou

$$\left. \frac{\partial T(r)}{\partial r} \right|_{r=1} = B_{ih}^* (T_R - T_m) \quad (\text{AIV.46})$$

$$B_{ih}^* = \frac{B_{ih}}{4 + B_{ih}} \quad (\text{AIV.47})$$

onde  $B_{ih}^*$ , equação (AIV.47), é igual ao número de Biot modificado gerado pela técnica de redução de Hermite.

## APÊNDICE V

### Método da Colocação Ortogonal

A utilização dos Métodos dos Resíduos Ponderados (MRP) resulta na obtenção de uma solução aproximada em termos de séries de funções conhecidas, chamadas de funções-tentativa. De uma forma geral, o método parte da expansão em um número arbitrário de termos, da solução desconhecida como uma combinação linear das funções-tentativa, com coeficientes a determinar. A solução aproximada proposta é substituída na equação diferencial, produzindo assim um resíduo. Fazendo com que a média ponderada deste resíduo se anule no domínio de interesse, cria-se as condições para a determinação dos coeficientes arbitrados na solução proposta. Esta metodologia básica é seguida por todos os métodos agrupados como MRP. A diferenciação entre eles será dada pelo critério de escolha da ponderação utilizada na determinação da média do resíduo.

Esquemáticamente, pode-se afirmar que a aplicação do MRP compreende três etapas fundamentais: a escolha do conjunto de funções-tentativa, a opção por um critério de ponderação e finalmente, o cálculo das aproximações sucessivas até que seja atingida a precisão desejada.

Os métodos mais conhecidos são: Método de Galerkin, Métodos dos Subdomínios, Método dos Mínimos Quadrados, Métodos dos Momentos, Método da Colocação e o Método da Colocação Ortogonal. Este último, desenvolvido por Villadsen e Stewart (1967) é o mais utilizado em problemas de engenharia química, sendo ele uma extensão do método clássico de colocação; só que não mais utilizando pontos de colocação arbitrários e sim, fazendo uso das raízes de polinômios ortogonais no intervalo. A colocação ortogonal foi desenvolvida na perspectiva de obtenção de uma metodologia que associasse à simplicidade de aplicação do método de colocação e a precisão dos resultados até então com o Método de Galerkin. Para efeito da metodologia geral do MRP, o Método de Colocação Ortogonal sugere como critério para determinação dos coeficientes, obrigar a que o resíduo se anule em pontos específicos do intervalo; o que vale dizer, raízes de um polinômio ortogonal.

Com relação a utilização do método da colocação ortogonal, considerações de natureza prática influíram decisivamente na sua preferência em relação aos outros métodos. Entre elas, a otimização da escolha dos pontos de colocação leva à necessidade de menos termos de expansão se comparados com os requeridos pelo método de colocação, e quando comparada com os Métodos de Galerkin ou dos Mínimos Quadrados, requer menor esforço na

manipulação de expressões algébricas, por exemplo, a não necessidade de resolução de integrais.

No entanto, quando é de interesse estudar algumas regiões particulares do domínio; ou porque haja variações bruscas no comportamento da solução, por exemplo, elevados gradientes, ou mesmo, pela maior relevância do fenômeno analisado. Então, neste caso pode acontecer de os pontos de colocação ortogonal correspondentes às funções-tentativa utilizadas não estarem localizados nestas regiões, onde é maior o interesse nos resultados. Visando atender de forma mais eficiente a este tipo de problema, foi desenvolvida a técnica de Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, muitas vezes chamada de Colocação "Spline". Esta metodologia foi proposta buscando combinar os pequenos erros de truncamento associados ao método da colocação ortogonal, com a capacidade do método de diferenças finitas em alocar os pontos onde forem necessários. Portanto, em linhas gerais esta técnica resume-se em dividir-se o domínio do problema em subdomínios menores, elementos, aplicando a colocação ortogonal em cada um deles. A obtenção de uma solução única para todo o domínio é conseguida, assegurando-se a continuidade da função e de sua primeira derivada, na fronteira entre os elementos. Técnica esta que tem encontrado diversas aplicações também na engenharia química.

Para mais detalhes consultar: Villadsen e Michelsen (1978, 1987), Finlayson (1980), Almeida (1987), Rocco Júnior (1991), Biscaia Jr. (1992), Kwong (1993), Rice e Do (1995) e Pinto e Lage (1997).

Após estes comentários introdutórios, apresenta-se o desenvolvimento matemático da aplicação do método da colocação ortogonal e do método da colocação ortogonal em elementos finitos para um modelo genérico de um reator tubular seguindo o procedimento dado por Villadsen e Michelsen (1978) para os casos de regime dinâmico e estacionário. Figuras representando cada método aplicado também são apresentadas com fim de facilitar a visualização da malha de pontos gerada pela discretização.

### **Modelo Dinâmico Pseudo-Homogêneo Genérico para um Reator Tubular:**

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \alpha_1 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right] + \beta_1 \frac{\partial X}{\partial z} + \gamma_1 R_w \quad (\text{AV.1})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \beta_2 \frac{\partial T}{\partial z} + \gamma_2 R_w \quad (\text{AV.2})$$

Balanco da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta_3 \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma_3 f \right] \quad (\text{AV.3})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{AV.4})$$

Balanco de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \beta_4 \frac{\partial T_R}{\partial z} + \gamma_4 (T(l, z, t) - T_R) \quad (\text{AV.5})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{AV.6})$$

$$r = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T(l, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AV.7})$$

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{AV.8})$$

onde  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  são os parâmetros do modelo dinâmico e as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada no Capítulo III.

Fazendo a seguinte mudança de variável, para evitar problemas de indeterminação no centro do reator:

$$u = r^2 \quad (\text{AV.9})$$

As equações ficam escritas da seguinte forma:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = 4 \alpha_1 \left[ \frac{\partial X}{\partial u} + u \frac{\partial^2 X}{\partial u^2} \right] + \beta_1 \frac{\partial X}{\partial z} + \gamma_1 R_w \quad (\text{AV.10})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 4 \alpha_2 \left[ \frac{\partial T}{\partial u} + u \frac{\partial^2 T}{\partial u^2} \right] + \beta_2 \frac{\partial T}{\partial z} + \gamma_2 R_w \quad (\text{AV.11})$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta_3 \left[ \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma_3 f \right] \quad (\text{AV.12})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{AV.13})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial t} = \beta_4 \frac{\partial T_R}{\partial z} + \gamma_4 (T(1, z, t) - T_R) \quad (\text{AV.14})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$u = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial u} = \frac{\partial T}{\partial u} = \text{finito} \quad (\text{simetria}) \quad (\text{AV.15})$$

$$u = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial u} = \frac{B_{ih}}{2} (T_R - T(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AV.16})$$

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } u \quad (\text{AV.17})$$

### Colocação Ortogonal Dupla

Discretizando simultaneamente as coordenadas radial e axial do reator, Colocação Ortogonal Dupla, o sistema de equações diferenciais parciais (EDP) se transforma num sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO). O qual pode ser integrado para se obter os perfis das variáveis dependentes nos pontos de colocação radial e axial gerados pelo método da colocação. Portanto, as equações que descrevem o comportamento dinâmico do reator nos pontos de colocação ficam da seguinte forma:

Balanço de Massa:

$$\frac{dX_{i,j}}{dt} = 4\alpha_1 \sum_{k=1}^{ntr} [AR_{i,k} + u_i BR_{i,k}] X_{k,j} + \beta_1 \sum_{k=0}^{nz} AZ_{j,k} X_{i,k} + \gamma_1 R_w(X_{i,j}, T_{i,j}) \quad (AV.18)$$

$$X_{ntr,j} = \frac{-\sum_{k=1}^{ntr} AR_{ntr,k} X_{k,j}}{AR_{ntr,ntr}} \quad (AV.19)$$

$$X_{i,0} = 0 \quad (AV.20)$$

Balanço de Energia:

$$\frac{dT_{i,j}}{dt} = 4\alpha_2 \sum_{k=1}^{ntr} [AR_{i,k} + u_i BR_{i,k}] T_{k,j} + \beta_2 \sum_{k=0}^{nz} AZ_{j,k} T_{i,k} + \gamma_2 R_w(X_{i,j}, T_{i,j}) \quad (AV.21)$$

$$T_{ntr,j} = \frac{0.5 B_{ih} T_R - \sum_{k=1}^{ntr} AR_{ntr,k} T_{k,j}}{AR_{ntr,ntr} + 0.5 B_{ih}} \quad (AV.22)$$

$$T_{i,0} = \frac{T_{fo}}{T_{ref}} \quad (AV.23)$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{dp_j}{dt} = \beta_3 \left[ \sum_{k=0}^{nz} AZ_{j,k} p_k + \gamma_3 f \right] \quad (\text{AV.24})$$

$$p_0 = \frac{p_o}{p_{ref}} \quad (\text{AV.25})$$

Equação da Continuidade:

$$(\rho_f V_f)_j = (\rho_f V_f)_{j-1} = G \quad (\text{AV.26})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{dT_{Rj}}{dt} = \beta_4 \sum_{k=0}^{nz} AZ_{j,k} T_{Rk} + \gamma_4 (T(l, z, t) - T_{Rj}) \quad (\text{AV.27})$$

$$T_{R0} = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad (\text{AV.28})$$

onde

$i = 1, \dots, nr$ ;

$j = 1, \dots, nz$ ;

$nr$  = número internos de pontos de colocação na direção radial;

$ntr$  = número total de pontos, internos + parede, de colocação na direção radial;

$nz$  = número internos de pontos de colocação na direção axial;

$i$  = índice do ponto de colocação na variável radial;

$j$  = índice do ponto de colocação na variável axial;

$AR, AZ, BR$  e  $BZ$  = são as matrizes para a derivada primeira e segunda do método da colocação ortogonal para direção radial e axial respectivamente, Villadsen e Michelsen (1978).



Na Figura AV.1 a seguir é apresentado a malha dos pontos gerados pela colocação dupla, possibilitando a visualização do método quando aplicado ao reator no regime dinâmico.

### Colocação Ortogonal Dupla

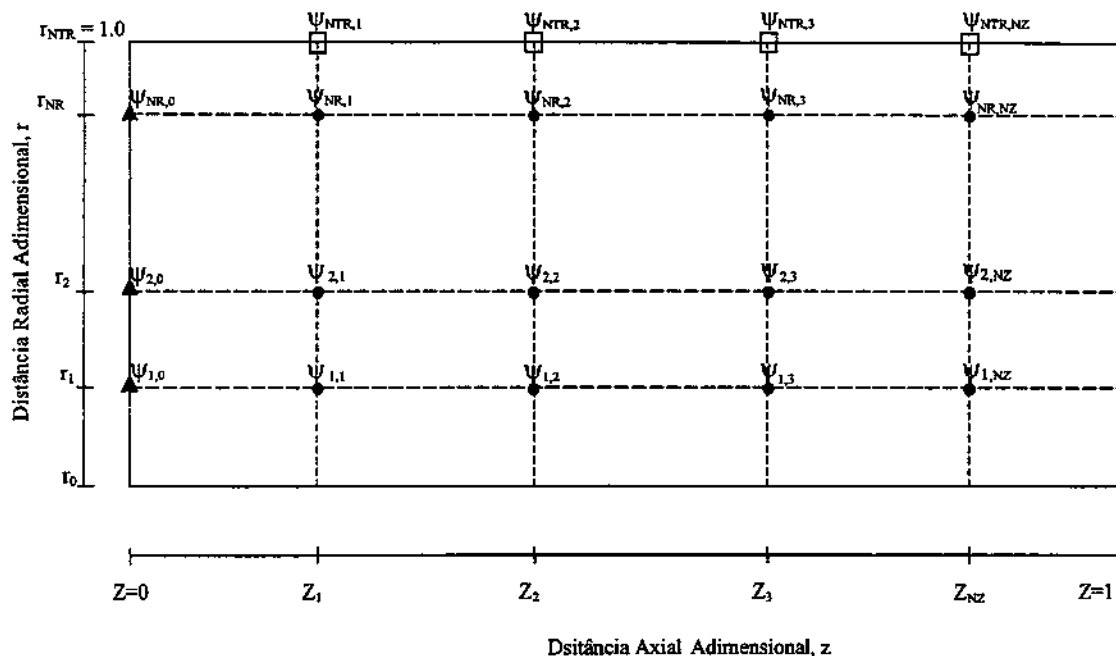


Figura AV.1 – Malha dos Pontos Gerados pela Colocação Ortogonal Dupla

- - pontos internos de colocação;
- - pontos das condições de contorno radiais;
- ▲ - pontos das condições iniciais axiais;
- $\psi$  - variável dependente qualquer.

O sistema de EDO anterior foi integrado com relação ao tempo utilizando os “softwares” LSODAR ou DASSL, para se obter o comportamento dinâmico do reator. Entretanto, zerando o termo temporal do sistema de EDO, tem-se um sistema de equações algébricas não-lineares, o qual sendo resolvido (pelo método de Newton-Raphson ou Homotopia, por exemplo) gera o comportamento estacionário do reator. Este procedimento não é normalmente utilizado devido a dificuldade de convergência na solução do sistema de equações algébricas não-lineares. O procedimento mais utilizado é zerar o termo temporal do modelo do reator e, então, discretizar a coordenada radial e integrar as variáveis dependentes ao longo comprimento axial do reator. Procedimento este que evita a solução do sistema de equações

algébricas não-lineares. Mais detalhes são apresentados nos Apêndices VI e VII.

Com relação ao regime estacionário, o modelo do reator tem a seguinte forma:

**Modelo Estacionário Pseudo-Homogêneo Genérico para um Reator Tubular:**

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial z} = \alpha_{est_1} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial X}{\partial r} \right] + \beta_{est_1} R_w \quad (AV.29)$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \alpha_{est_2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \beta_{est_2} R_w \quad (AV.30)$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \gamma_{est} f \quad (AV.31)$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (AV.32)$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial z} = \beta_{est_4} (T(l, z, t) - T_R) \quad (AV.33)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (AV.34)$$

$$r=1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = B_{ih} (T_R - T(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AV.35})$$

$$z=0 \quad X=0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } r \quad (\text{AV.36})$$

onde  $\alpha_{est_i}$ ,  $\beta_{est_i}$ ,  $\gamma_{est_i}$  são os parâmetros do modelo estacionário e as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada no Capítulo III.

Fazendo a mesma mudança de variável citada anteriormente, temos o seguinte modelo:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial z} = 4 \alpha_{est_1} \left[ \frac{\partial X}{\partial u} + u \frac{\partial^2 X}{\partial u^2} \right] + \beta_{est_1} R_w \quad (\text{AV.37})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 4 \alpha_{est_2} \left[ \frac{\partial T}{\partial u} + u \frac{\partial^2 T}{\partial u^2} \right] + \beta_{est_2} R_w \quad (\text{AV.38})$$

Balanço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \gamma_{est} f \quad (\text{AV.39})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0 \quad (\text{AV.40})$$

Balanço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial z} = \beta_{est_4} (T(1, z, t) - T_R) \quad (\text{AV.41})$$

com a seguintes condições de contorno:

$$u = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial u} = \frac{\partial T}{\partial u} = \text{finito} \quad (\text{simetria}) \quad (\text{AV.42})$$

$$u = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial u} = \frac{B_{ih}}{2} (T_R - T(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AV.43})$$

$$z = 0 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } u \quad (\text{AV.44})$$

### Colocação Ortogonal Simples

Discretizando a coordenada radial do reator, Colocação Ortogonal Simples, o sistema de EDP se transforma num sistema de EDO . Integrando o sistema obtém-se os perfis estacionários das variáveis dependentes nos pontos de colocação radial gerados pelo método da colocação ao longo do comprimento axial. Portanto, o sistema de EDO que descreve o comportamento estacionário do reator nos pontos de colocação radial fica da seguinte forma:

Balanço de Massa:

$$\frac{dX_i}{dt} = 4 \alpha \text{est}_1 \sum_{k=1}^{ntr} [AR_{i,k} + u_i BR_{i,k}] X_k + \beta \text{est}_1 R_w(X_i, T_i) \quad (\text{AV.45})$$

$$X_{ntr} = \frac{- \sum_{k=1}^{ntr} AR_{ntr,k} X_k}{AR_{ntr,ntr}} \quad (\text{AV.46})$$

$$X_0 = 0 \quad (\text{AV.47})$$

Balanço de Energia:

$$\frac{dT_i}{dt} = 4 \alpha est_2 \sum_{k=1}^{ntr} [AR_{i,k} + u_i BR_{i,k}] T_k + \beta est_2 R_w(X_i, T_i) \quad (AV.48)$$

$$T_{ntr} = \frac{0.5 B_{ih} T_R - \sum_{k=1}^{ntr} AR_{ntr,k} T_k}{AR_{ntr,ntr} + 0.5 B_{ih}} \quad (AV.49)$$

$$T_0 = \frac{T_{fo}}{T_{ref}} \quad (AV.50)$$

Balanco da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{dp}{dz} = \gamma est f \quad (AV.51)$$

$$p_0 = \frac{P_o}{P_{ref}} \quad (AV.52)$$

Equação da Continuidade:

$$(\rho_f V_f)_j = (\rho_f V_f)_{j-1} = G \quad (AV.53)$$

Balanco de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{dT_R}{dz} = \beta est_4 (T(l, z, t) - T_R) \quad (AV.54)$$

$$T_{R0} = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad (AV.55)$$

onde os índices e símbolos seguem a mesma nomenclatura anterior.

Na Figura AV.2 apresenta-se a malha dos pontos gerados pela colocação simples para o caso do regime estacionário, onde observa-se as diferenças com o regime dinâmico apresentada na Figura AV.1.

## Colocação Ortogonal Simples

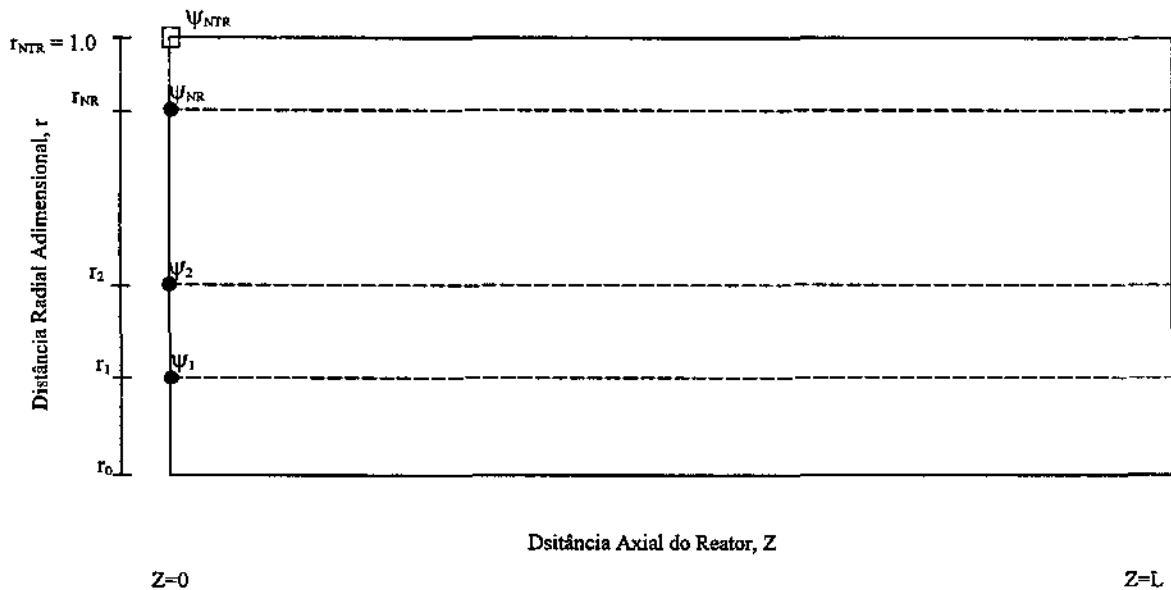


Figura AV.2 – Malha dos Pontos Gerados pela Colocação Ortogonal Simples

- - pontos internos de colocação;
- - pontos das condições de contorno radiais;
- ψ - variável dependente qualquer.

Em determinadas situações se faz necessário a utilização da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos. Portanto, nesta situação quebra-se o comprimento axial do reator num certo número de elementos, conforme a necessidade, e em cada elemento aplica-se o método da Colocação Ortogonal, e entre os elementos respeita-se as condições de continuidade. Afim de exemplificar a aplicação do método, no caso do regime dinâmico, o equacionamento para cada elemento fica da seguinte forma, já com a mudança de variável sugerida:

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial X_L}{\partial t} = 4 \alpha_{1,L} \left[ \frac{\partial X_L}{\partial u} + u_L \frac{\partial^2 X_L}{\partial u^2} \right] + \frac{\beta_{1,L}}{L_L} \frac{\partial X_L}{\partial z} + \gamma_{1,L} R_w(X_L, T_L) \quad (\text{AV.56})$$

Balanco de Energia:

$$\frac{\partial T_L}{\partial t} = 4 \alpha_{2,L} \left[ \frac{\partial T_L}{\partial u} + u_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial u^2} \right] + \frac{\beta_{2,L}}{L_L} \frac{\partial T_L}{\partial z} + \gamma_{2,L} R_w(X_L, T_L) \quad (\text{AV.57})$$

Balanco da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p_L}{\partial t} = \frac{\beta_{3,L}}{L_L} \left[ \frac{\partial p_L}{\partial z} + \gamma_{3,L} f \right] \quad (\text{AV.58})$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f)_L = 0 \quad (\text{AV.59})$$

Balanco de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_{R,L}}{\partial t} = \frac{\beta_{4,L}}{L_L} \frac{\partial T_{R,L}}{\partial z} + \gamma_{4,L} (T(1, z, t, L) - T_{R,L}) \quad (\text{AV.60})$$

com a seguintes condições de contorno:

$$u = 0 \quad \left. \frac{\partial X}{\partial u} \right|_L = \left. \frac{\partial T}{\partial u} \right|_L = \text{finito} \quad (\text{simetria}) \quad (\text{AV.61})$$

$$u = 1 \quad \left. \frac{\partial X}{\partial u} \right|_L = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial u} \right|_L = \frac{B_{ih}}{2} (T_{RL} - T(1, z, t, L)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AV.62})$$

$$z = 0, L = 1 \quad X = 0, \quad T = \frac{T_{fo}}{T_{ref}}, \quad p = \frac{p_o}{p_{ref}}, \quad T_R = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad \text{para todo } u \quad (\text{AV.63})$$

e as condições de continuidade:

$$X_{L-1} = X_L, \quad T_{L-1} = T_L, \quad T_{R,L-1} = T_{R,L}, \quad p_{L-1} = p_L \quad \text{para } L = 2, \dots, \text{nel} \quad (\text{AV.64})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{L_{L-1}} \frac{\partial X}{\partial z} \Big|_{L-1} &= \frac{1}{L_L} \frac{\partial X}{\partial z} \Big|_L, & \frac{1}{L_{L-1}} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{L-1} &= \frac{1}{L_L} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_L, \\ \frac{1}{L_{L-1}} \frac{\partial T_R}{\partial z} \Big|_{L-1} &= \frac{1}{L_L} \frac{\partial T_R}{\partial z} \Big|_L, & \frac{1}{L_{L-1}} \frac{\partial p}{\partial z} \Big|_{L-1} &= \frac{1}{L_L} \frac{\partial p}{\partial z} \Big|_L \end{aligned}$$

para  $L = 2, \dots, \text{nel}$   
(AV.65)

### Colocação Ortogonal em Elementos Finitos

Balanco de Massa:

$$\begin{aligned} \frac{dX_{i,j,L}}{dt} &= 4 \alpha_{1,L} \sum_{k=1}^{ntrL} [AR_{i,k,L} + u_{i,L} BR_{i,k,L}] X_{k,j,L} + \frac{\beta_{1,L}}{L_L} \sum_{k=0}^{nztL} AZ_{j,k,L} X_{i,k,L} + \\ &\quad \gamma_{1,L} R_W(X_{i,j,L}, T_{i,j,L}) \end{aligned}$$

(AV.66)

$$X_{ntrL,j,L} = \frac{- \sum_{k=1}^{ntrL} AR_{ntrL,k,L} X_{k,j,L}}{AR_{ntrL,ntrL,L}}$$

(AV.67)

$$X_{i,0,L} = 0$$

(AV.68)

$$X_{i,j,L} = X_{i,j,l-L}$$

(AV.69)

$$L_L \left( \sum_{k=1}^{ntz(L-1)} AZ_{i,k,L-1} X_{k,j,L-1} \right) = L_{L-1} \left( \sum_{k=1}^{ntzL} AZ_{i,k,L} X_{k,j,L} \right)$$

(AV.70)

Balanco de Energia:

$$\begin{aligned} \frac{dT_{i,j,L}}{dt} &= 4 \alpha_{2,L} \sum_{k=1}^{ntrL} [AR_{i,k,L} + u_{i,L} BR_{i,k,L}] T_{k,j,L} + \frac{\beta_{2,L}}{L_L} \sum_{k=0}^{nztL} AZ_{j,k,L} T_{i,k,L} + \\ &\quad \gamma_{2,L} R_W(X_{i,j,L}, T_{i,j,L}) \end{aligned}$$

(AV.71)



$$T_{ntr,j,L} = \frac{0.5 B_{ihL} T_{R,L} - \sum_{k=1}^{nL} AR_{ntrl,k,L} T_{k,j,L}}{AR_{ntrL,ntrL,L} + 0.5 B_{ihL}} \quad (AV.72)$$

$$T_{i,0,L} = \frac{T_{fo}}{T_{ref}} \quad (AV.73)$$

$$T_{i,j,L} = T_{i,j,L-1} \quad (AV.74)$$

$$L_L \left( \sum_{k=1}^{ntz(l-1)} AZ_{i,k,L-1} T_{k,j,L-1} \right) = L_{L-1} \left( \sum_{k=1}^{ntzL} AZ_{i,k,L} T_{k,j,L} \right) \quad (AV.75)$$

Balço da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{dp_{j,L}}{dt} = \frac{\beta_{3,L}}{L_L} \left[ \sum_{k=0}^{nzL} AZ_{j,k,L} p_{k,L} + \gamma_{3,L} f \right] \quad (AV.76)$$

$$p_{0,L} = \frac{p_o}{p_{ref}} \quad (AV.77)$$

$$p_{i,j,L} = p_{i,j,L-1} \quad (AV.78)$$

$$L_L \left( \sum_{k=1}^{ntz(L-1)} AZ_{i,k,L-1} p_{k,j,L-1} \right) = L_{L-1} \left( \sum_{k=1}^{ntzL} AZ_{i,k,L} p_{k,j,L} \right) \quad (AV.79)$$

Equação da Continuidade:

$$(\rho_f V_f)_{j,L} = (\rho_f V_f)_{j,L-1} = G_L \quad (AV.80)$$

Balço de Energia do Fluido Refrigerante:

$$\frac{dT_{R,j,L}}{dt} = \frac{\beta_{4,L}}{L_l} \sum_{k=0}^{nzL} AZ_{j,k,L} T_{R,k,L} + \gamma_{4,L} (T(l,z,t,L) - T_{R,j,L}) \quad (AV.81)$$

$$T_{R0,L} = \frac{T_{ro}}{T_{ref}} \quad (AV.82)$$

$$T_{Ri,j,L} = T_{Ri,j,L-1} \quad (AV.83)$$

$$L_L \left( \sum_{k=1}^{ntz(L-1)} AZ_{i,k,L-1} T_{Rk,j,L-1} \right) = L_{L-1} \left( \sum_{k=1}^{ntzL} AZ_{i,k,L} T_{Rk,j,L} \right) \quad (AV.84)$$

onde:

$L$  = comprimento de um determinado elemento;

$L$  = índice do elemento.

A Figura AV.3 apresenta a divisão do sistema em elementos e suas respectivas malhas de pontos gerados pela colocação ortogonal em elementos finitos no caso do regime dinâmico do reator catalítico de leito fixo. Estas representações possibilitam facilitar a visualização da aplicação dos distintos métodos de colocação neste trabalho.

A aplicação do método resulta em um sistema de equações algébricas lineares e diferenciais ordinárias, que devem ser resolvidas simultaneamente. Neste trabalho fez-se uso do algoritmo de Thomas conjuntamente com o “software” LSODAR. Também poderia se resolver este sistema somente com o “software” DASSL.

Deve-se ressaltar que as coordenadas axiais e radiais sempre estão adimensionalizadas entre 0 e 1 para todo o reator e também para cada elemento quando do uso da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos.

## Colocação Ortogonal Dupla em Elementos Finitos

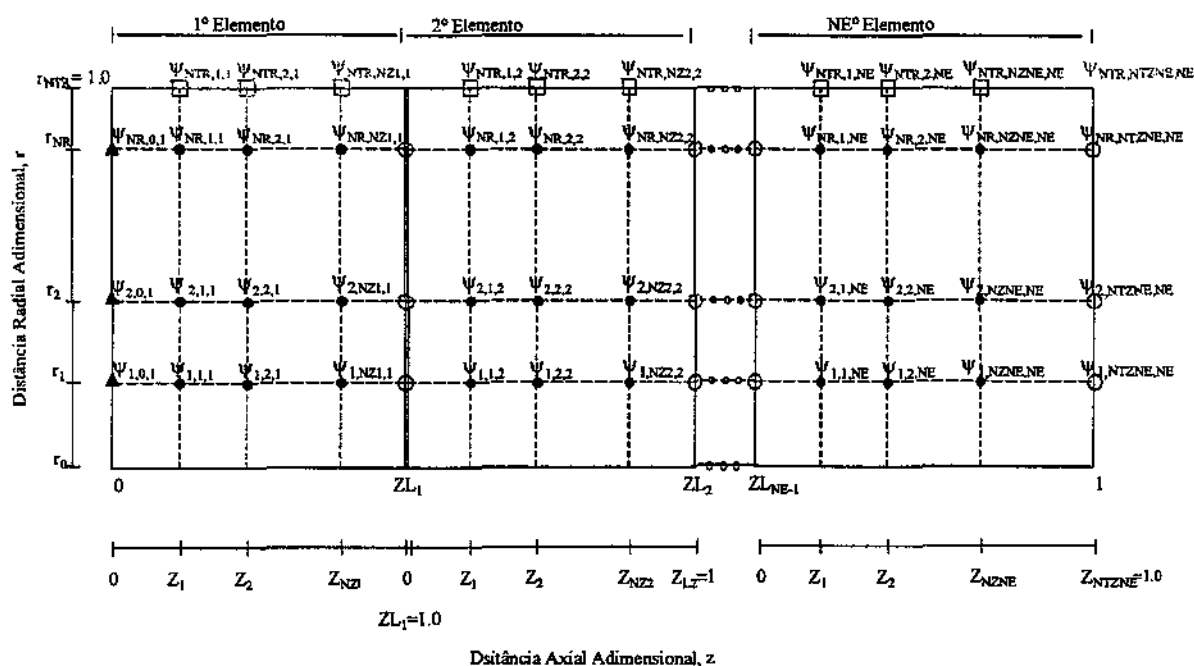


Figura AV.3 – Malha dos Pontos Gerados pela Colocação Ortogonal Dupla em Elementos Finitos

- - pontos internos de colocação;
- - pontos de continuidade entre elementos;
- - pontos das condições de contorno radiais;
- ▲ - pontos das condições iniciais axiais;
- $\psi$  - variável dependente qualquer.

## APÊNDICE VI

### Solução de Sistemas de Equações Algébricas Não-Lineares

Como apresentado no Apêndice V, na solução do regime estacionário do modelo de um reator catalítico de leito fixo existem duas possibilidades de abordar o problema. A primeira consiste na aplicação do método da colocação ortogonal na variável radial e integração numérica através da variável axial em modelos que negligenciam a dispersão axial, MÉTODO1. Este método é amplamente utilizado pela sua maior facilidade de solução e convergência, além de necessitar de menor tempo computacional. A segunda, MÉTODO2, é utilizada se o modelo apresenta ou não dispersão axial, e consiste na aplicação da colocação ortogonal em ambas as variáveis radial e axial, colocação dupla, conjuntamente com um método de solução de sistema de equações algébricas não-lineares. O MÉTODO2 é menos utilizado devido as dificuldades de implementação e convergência, além de exigir maior tempo computacional que o anterior, Toledo e Maciel (1995).

Visando compreender as dificuldades de implementação do MÉTODO2, aplicou-se este método num modelo pseudo-homogêneo clássico do reator catalítico de leito fixo com as seguintes considerações:

- propriedades físicas e coeficientes de transferência constantes;
- perfil de velocidade “plug flow”;
- temperatura de refrigeração constante;
- reação irreversível de primeira ordem;
- dispersão axial é desprezível.

Portanto, tem-se o seguinte modelo para o estado estacionário já adimensionalizado:

#### **Modelo Estacionário Pseudo-Homogêneo Clássico de um Reator Tubular:**

Balanço de Massa:

$$\frac{\partial C_A}{\partial z} = \frac{D_{ef}}{R_t^2} \frac{L}{u_s} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right] + \frac{L}{u_s} K C_A \quad (AVI.1)$$

Balanço de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\lambda_{ef}}{R_t^2 \rho_f C_{pf}} \frac{L}{u_s} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \frac{1}{T_{fo}} \frac{L}{u_s} \frac{(-\Delta H_R)}{\rho_f C_{pf}} K C_A \quad (\text{AVI.2})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r=0 \quad \frac{\partial C_A}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria}) \quad (\text{AVI.3})$$

$$r=1 \quad \frac{\partial C_A}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{h_w R_t}{\lambda_{ef}} (T_R - T(1, z, t)) \quad \text{para todo } z \quad (\text{AVI.4})$$

$$z=0 \quad C_A = C_{ao}, \quad T = 1.0 \quad \text{para todo } r \quad (\text{AVI.5})$$

onde  $C_A$  é a concentração do reagente A, ( $\text{kmol/m}^3$ ),  $C_{ao}$  é a concentração do reagente A na alimentação, ( $\text{kmol/m}^3$ ),  $C_{pf}$ , o calor específico do gás, ( $\text{kcal/kg.K}$ ),  $D_{ef}$  difusividade efetiva radial, ( $\text{m}^2/\text{h}$ ),  $h_w$  coeficiente de transferência de calor da parede interna do reator, ( $\text{kcal}/(\text{m}^2.\text{h.K})$ ).  $L$  comprimento do reator, ( $\text{m}$ ),  $r$  o comprimento radial adimensional do reator,  $R_t$  raio do reator, ( $\text{m}$ ).  $T$  a temperatura adimensional do reator,  $T_{fo}$  temperatura de alimentação, ( $\text{K}$ ),  $T(1, z, t)$  temperatura adimensional da parede do reator,  $T_R$  temperatura adimensional do fluido refrigerante,  $u_s$  velocidade superficial, ( $\text{m/h}$ ),  $z$  comprimento axial adimensional do reator,  $\lambda_{ef}$  condutividade efetiva radial, ( $\text{kcal}/\text{m.h.K}$ ),  $\Delta H_R$  entalpia de reação molar, ( $\text{kcal/kmol}$ ),  $\rho_f$  densidade do fluido reagente, ( $\text{kg/m}^3$ ) e  $K$  é a constante de Arrhenius.

A razão deste estudo, além da já citada, esta na utilização do modelo de um reator catalítico de leito fixo para estudos de estabilidade e comportamento dinâmico. Nestes casos é importante uma solução do estado estacionário a mais precisa possível.

No caso específico do estudo do comportamento dinâmico, a solução consiste na aplicação da colocação ortogonal dupla nas variáveis radial e axial com a integração ao longo do tempo. Portanto, as equações do modelo dinâmico após a aplicação da colocação dupla exceto o termo de variação temporal, são semelhantes as equações obtidas pela aplicação da colocação dupla ao modelo estacionário do reator. Obviamente, a solução pelo MÉTODO2, quando se consegue convergência, geralmente vai zerar as equações do modelo dinâmico com maior precisão do que o MÉTODO1, como mostram os resultados a seguir apresentados nas Tabelas AVI.1 e AVI.2.

Quando se utiliza a solução do MÉTODO1 como condição inicial para a solução do modelo dinâmico, há um tempo de oscilação para atingir um novo estado estacionário, pois devido a sua menor precisão gera uma perturbação no modelo dinâmico inicialmente. Esta perturbação pode ser de grande ou pequena magnitude. Para sistemas muito sensíveis grandes perturbações podem levar o sistema para bem longe do estado estacionário calculado inicialmente, mostrando a importância de soluções bem precisas.

Para a solução do sistema de equações algébricas não-lineares usado pelo MÉTODO2, o “software” desenvolvido neste trabalho oferece a opção de selecionar um dos seguintes algoritmos:

1. Newton Raphson;
2. Newton Raphson com Convergência Global (Numerical Recipes);
3. Powell Híbrido (IMSL);
4. Levemberg Marquart com/sem restrições (IMSL);
5. Homotopia Clássica;
6. Homotopia Perpendicular ao Parâmetro  $t$ ;
7. Dois Tipos de Homotopia Perpendicular ao Vetor  $v$ .

Outro detalhe importante do “software”, é que há a opção de escolher como chute inicial para a solução do MÉTODO2 a solução do MÉTODO1 ou um chute dado pelo usuário.

Para uma breve descrição dos métodos de Newton-Raphson, Homotopia e da função objetiva utilizada no método de Levemberg Marquart consultar o Apêndice VII.

Os resultados obtidos utilizando os MÉTODO1 e MÉTODO2 estão representados nas figuras e tabelas a seguir. Dois conjuntos de parâmetros de operação distintos foram avaliados.

#### CONJUNTO1:

$C_{ao} = 0.3 \text{ kmol/m}^3$ ;  
 $C_{pfs} = 1.0 \text{ kcal/kg.K}$ ;  
 $D_{ef} = 0.001 \text{ m/h}$ ;  
 $h_w = 100.0 \text{ kcal/(m}^2 \cdot \text{h.K)}$ ;  
 $L = 4.0 \text{ m}$ ;  
 $R_t = 0.02 \text{ m}$ ;  
 $T_{fo} = 600.0 \text{ K}$ ;  
 $T_R = 650.0 \text{ K}/600.0 \text{ K}$ ;  
 $u_s = 1.0 \text{ m/h}$ ;

$$\lambda_{ef} = 0.5 \text{ kcal}/(\text{m.h.K});$$

$$\rho_f = 800.0 \text{ kg/m}^3.$$

CONJUNTO2:

$$C_{ao} = 0.3 \text{ kmol/m}^3;$$

$$C_{pf} = 1.0 \text{ kcal/kg.K};$$

$$D_{ef} = 0.001 \text{ m/h};$$

$$h_w = 100.0 \text{ kcal}/(\text{m}^2.\text{h.K});$$

$$L = 1.0 \text{ m};$$

$$R_t = 0.02 \text{ m};$$

$$T_{fo} = 630.0 \text{ K};$$

$$T_R = 680.0 \text{ K}/630.0 \text{ K};$$

$$u_s = 1.0 \text{ m/h};$$

$$\lambda_{ef} = 0.5 \text{ kcal}/(\text{m.h.K});$$

$$\rho_f = 800.0 \text{ kg/m}^3.$$

Utilizando o CONJUNTO1 obteve-se a Figura AVI.1, Figura AVI.2 e Tabela AVI.1 e o CONJUNTO2 a Figura AVI.3, Figura AVI.4 e Tabela AVI.2.

Quando o MÉTODO2 utilizou Newton-Raphson para a solução do estado estacionário do reator com os dados de parâmetros do CONJUNTO2 não se obteve convergência, sendo necessário utilizar métodos mais sofisticados, como os de Homotopia e de Levemberg-Marquart.

As figuras a seguir (Figura AVI.1, Figura AVI.2, Figura AVI.3, Figura AVI.4) mostram os perfis de temperatura radiais para algumas posições axiais adimensionais do reator e as tabelas mostram a precisão que ambos os métodos zeram as equações do regime dinâmico para uma condição de operação específica. As figuras mostram uma diferença nas respostas de ambos os métodos, a qual é melhor entendida pela observação das Tabelas AVI.1 e AVI.2. Estas tabelas mostram que para uma condição de operação específica o MÉTODO2 apresenta um melhor desempenho em comparação ao MÉTODO1, como já mencionado. Pode-se observar facilmente pelas figuras que os dois métodos levam a soluções bem distintas.

Para outras condições de operação estudadas em que ambos os métodos convergiram, notou-se uma boa concordância das soluções e uma diferença menos marcante das apresentadas na Tabelas AVI.1 e AVI.2. No estudo para outras condições de operação observa-se que o MÉTODO1 quase sempre converge, exceto para condições de operação drásticas, já o MÉTODO2 nem sempre converge com a mesma facilidade do MÉTODO1, havendo as vezes

necessidade de se utilizar a solução do MÉTODO1 como chute inicial para o MÉTODO2 alcançar a convergência desejada. E com relação a sistemas isotérmicos, tanto o MÉTODO2 como o MÉTODO1 convergem de forma satisfatória.

Umas das dificuldades de convergência do MÉTODO2 é decorrente da não-linearidade apresentada pela equação da temperatura, principalmente devido às constantes cinéticas, e outra pela grande quantidade de equações e variáveis a serem resolvidas pelo método de solução de equações algébricas não-lineares, no caso apresentado havia 50 equações algébricas não-lineares e 50 variáveis, formando um sistema de difícil solução. Este sistema foi originado pela aplicação da colocação dupla com 5 pontos de colocação internos na direção radial e axial, o que realmente mostra a dificuldade da utilização do MÉTODO2 para a solução do estado estacionário do modelo do reator. Portanto, é mais conveniente a utilização do MÉTODO1, embora sua solução ocasione oscilações na simulação dinâmica do reator quando ela é usada como condição inicial.

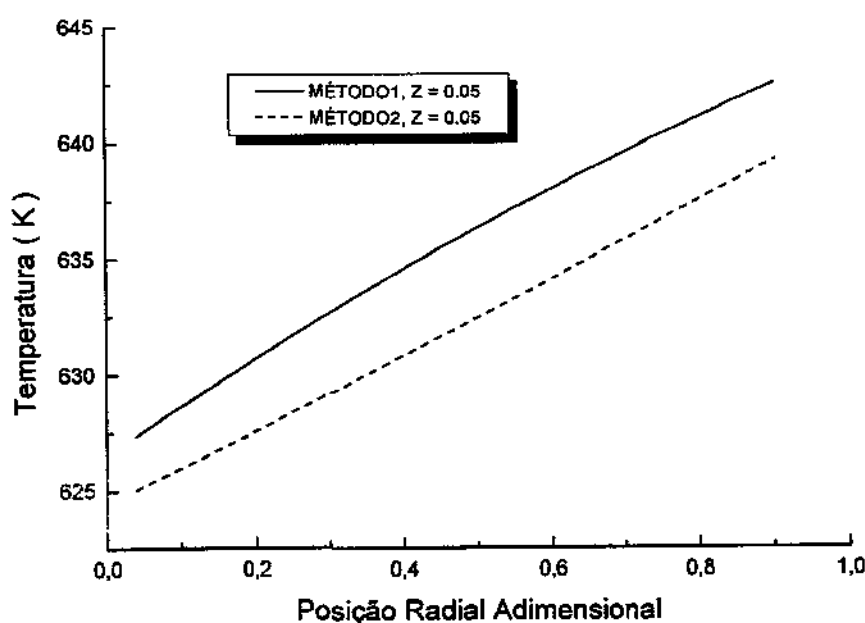


Figura AVI.1 – Solução do Estado Estacionário do Reator



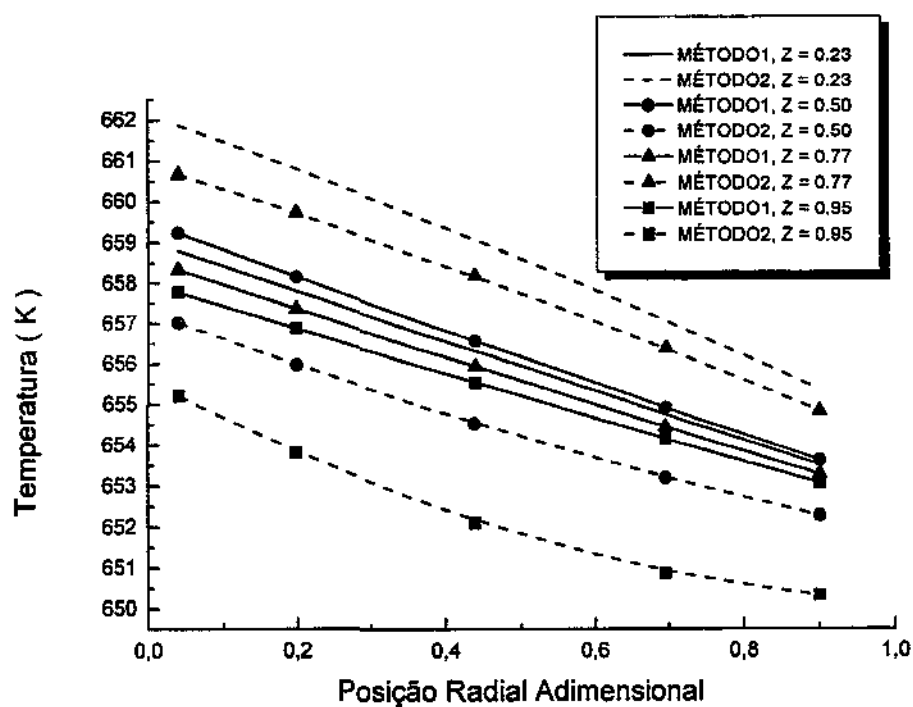


Figura AVI.2 – Solução do Estado Estacionário do Reator

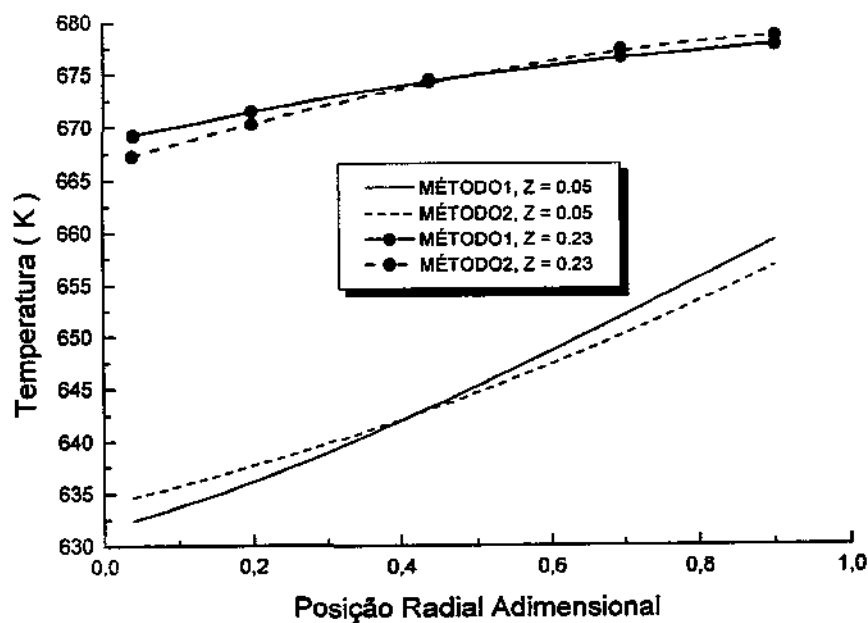


Figura AVI.3 – Solução do Estado Estacionário do Reator

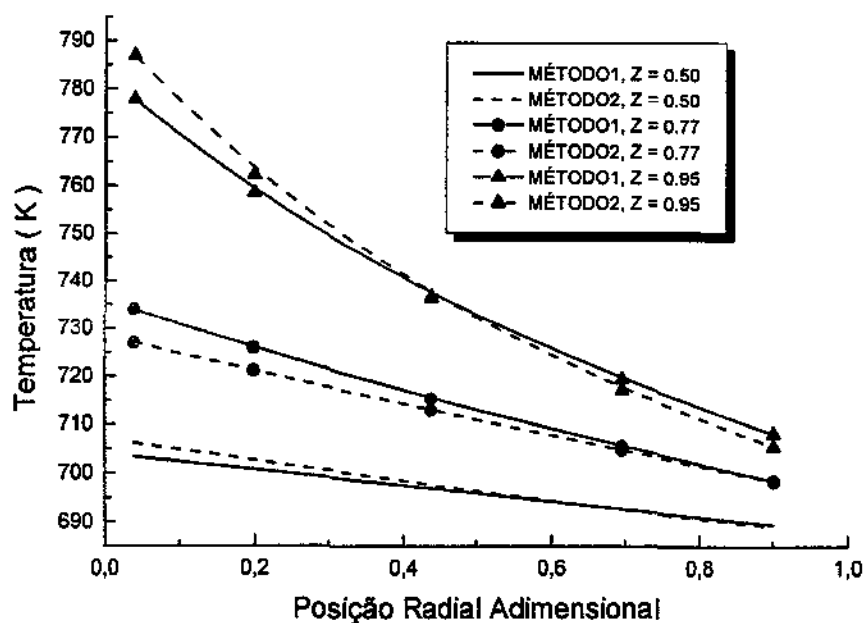


Figura AVI.4 – Solução do Estado Estacionário do Reator

DERIVADA DO DINÂMICO	MÉTODO1	MÉTODO2
$\frac{dT_{35}}{dt}$	- 1.2854e-01	1.0547e-15
$\frac{dT_{41}}{dt}$	- 1.1771e-01	- 1.6098e-14
$\frac{dT_{51}}{dt}$	- 1.6425e-01	- 4.5519e-14
$\frac{dT_{55}}{dt}$	- 2.0503e-01	- 1.1796e-15

Tabela AVI.1- Valor das Derivadas das Funções do Regime Dinâmico utilizando CONJUNTO1

DERIVADA DO DINÂMICO	MÉTODO1	MÉTODO2
$\frac{dT_{15}}{dt}$	4.3189e-01	1.4077e-4
$\frac{dT_{45}}{dt}$	- 2.1751e-01	3.4475e-5
$\frac{dT_{51}}{dt}$	- 3.4894e-01	5.6847e-5
$\frac{dT_{55}}{dt}$	- 4.4519e-01	2.1010e-5

Tabela A VI.2- Valor das Derivadas das Funções do Regime Dinâmico utilizando CONJUNTO2

Onde  $\frac{dX_{ij}}{dt}$ , significa a derivada da variável X pela variável temporal no ponto de colocação interno de posição radial i e axial j. Os números significam o valor das funções do dinâmico,  $\frac{dX_{ij}}{dt}$ , calculado com as soluções do MÉTODO1 e MÉTODO2 respectivamente.

Mais detalhes consultar Toledo e Maciel (1995).

## APÊNDICE VII

### Métodos de Solução de Sistema de Equações Algébricas Não-Lineares

#### Método de Newton-Raphson

O método de Newton-Raphson é um método que permite resolver um sistema de  $n$  equações não-lineares para  $n$  variáveis definido por:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned} \tag{AVII.1}$$

ou então, na forma vetorial:

$$f(x) = 0 \tag{AVII.2}$$

O método de Newton-Raphson tem como princípio a linearização de  $f$  usando a série de Taylor de primeira ordem e desprezando os termos de ordem superior. A função linearizada  $f_i(x_j)$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  é dada por:

$$f_i(x^{k+1}) = f_i(x^k) + \sum_{j=1}^n \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{x^k} (x_j^{k+1} - x_j^k) \tag{AVII.3}$$

O jacobiano é definido pela equação (AVII.4):

$$J_{i,j}^k = \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{x^k} \tag{AVII.4}$$

e igualando  $f_i(x^{k+1}) = 0$ , têm-se a equação (AVII.5):

$$\sum_{j=1}^n J_{i,j}^k (x_j^{k+1} - x_j^k) = -f_i(x^k) \quad (\text{AVII.5})$$

ou

$$x_j^{k+1} = x_j^k - \sum_{i=1}^n (J^k)_{j,i}^{-1} f_i(x^k) \quad (\text{AVII.6})$$

Para resolver o sistema de equações lineares formado pelo método de Newton-Raphson, pode-se utilizar o método LU no caso da equação (AVII.5) ou calcular a matriz inversa do jacobiano, equação (AVII.6).

Uma das desvantagens do método de Newton-Raphson é a necessidade de se ter valores iniciais de  $x$  próximos à solução final. Uma alteração dos valores pode dificultar o processo de convergência ou mesmo, provocar a não convergência do método. Uma abordagem alternativa para este tipo de problema é a utilização dos métodos de Homotopia.

Uma outra maneira de contornar o problema dos péssimos valores iniciais é utilizar o algoritmo de otimização do “passo descendente” ou do Levenberg Marquart. Embora com características de convergência bem mais lenta, este procedimento leva os valores iniciais para mais próximo dos valores finais do que utilizando o método de Newton-Raphson.

Em termos práticos, as dificuldades associadas ao método de Newton-Raphson estão relacionadas ao cálculo do jacobiano, já que nem sempre este pode ser feito analiticamente, tendo-se que recorrer aos métodos numéricos. Mas, mesmo assim, o método de Newton-Raphson tem sido empregado em vários trabalhos envolvendo sistema de equações algébricas não-lineares.

Para mais detalhes consultar as seguintes referências: Carnahan et al. (1969), Holland e Liapis (1983), Davis (1984), Stark (1984), Press et al. (1988), Chapra e Canale (1989), Burden e Faires (1989), Silva (1992), Kwong (1993), Cunha (1993) e Pinto e Lage (1997).

### Método da Homotopia

Nos últimos anos houve uma crescente aplicação do Método da Continuação Homotópica na solução de problemas ligados a diversos ramos da Engenharia Química. O sucesso deste método está relacionado com sua robustez e a sua capacidade de localizar todas as soluções de um sistema de equações algébricas não-lineares.

O conceito básico deste método é produzir uma transição suave entre um sistema simples,  $g(x) = 0$ , cuja solução é conhecida ou pode ser facilmente encontrada, e o sistema de interesse,  $f(x) = 0$ , cuja solução queremos obter. Um novo sistema, o sistema homotópico, é construído a partir de  $f(x)$  e  $g(x)$ :

$$h(x, t) = h[f(x), g(x), t] = 0 \quad (\text{AVII.7})$$

e

$$h(x_0, 0) = g(x_0) = 0 \quad (\text{AVII.8})$$

$$h(x_N, 1) = f(x_N) = 0 \quad (\text{AVII.9})$$

Aqui  $x$  representa o vetor de variáveis independentes,  $x_0$  é o  $x$  inicial e a solução de  $g(x) = 0$ ,  $x_N$  é a solução de  $f(x) = 0$  e  $t$  é o parâmetro (escalar) homotópico. Portanto:

$$h(x, t) = t f(x) + (1 - t) g(x) = 0 \quad (\text{AVII.10})$$

Como o sistema homotópico relaciona  $n$  equações com  $n+1$  incógnitas, sobre condições razoáveis, a sua solução irá conter um componente unidimensional, conhecido como caminho homotópico, ligando  $x_0$  (quando  $t = 0$ ) com  $x_N$  ( $t = 1$ ).

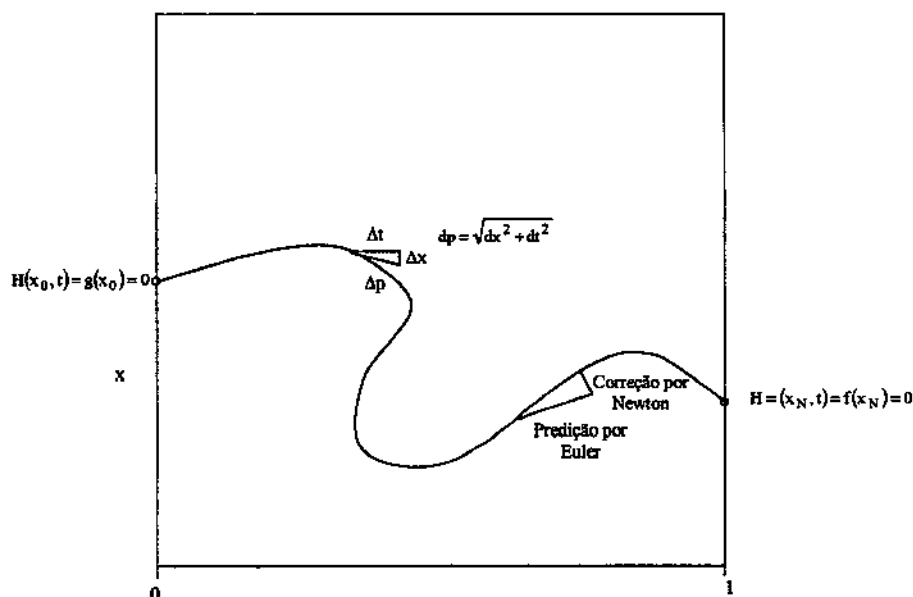


Figura AVII.1 – Caminho Homotópico

A chave do método da Continuação Homotópica está em determinar o caminho homotópico desde  $t = 0$  (solução do problema simples) até  $t = 1$  (solução do problema difícil, a qual se quer obter). Isto é feito através de algoritmos predição-correção. Para a etapa de predição diferencia-se a equação homotópica para obter um Problema de Valor Inicial que é resolvido por algum método numérico específico (por exemplo, o método de Euler); e para a correção do caminho homotópico usa-se o método de Newton-Raphson conforme mostrado na Figura AVII.1.

As escolhas de  $g(x)$  mais utilizadas são mostradas na tabela abaixo e definem o tipo de homotopia:

Homotopia	$g(x)$	$h(x,t)$
Newton	$f(x) - f(x_0)$	$f(x) - (1 - t) f(x_0)$
Ponto Fixo	$x - x_0$	$t f(x) - (1 - t) (x - x_0)$
"Afinne"	$D_x f(x_0) (x - x_0)$	$t f(x) - (1 - t) D_x f(x_0) (x - x_0)$

Tabela AVII.1 - Funções  $g(x)$  mais comuns

Conforme a escolha de  $g(x)$  temos uma homotopia específica, a qual tem suas vantagens e desvantagens em relação as demais. Portanto, para cada situação específica a ser estudada deve-se verificar qual a homotopia mais apropriada.

Se  $x$  é a solução de  $h(x,t) = 0$ , então  $x$  também é função do parâmetro  $t$ . Então, há várias maneiras de construir iterativamente o trajeto ligando  $t = 0$  a  $t = 1$  ao longo da curva  $x = x(t)$ . As duas principais aproximações podem ser denominadas de:

- continuação numérica;
- continuação por diferenciação.

Ambas homotopias citadas anteriormente fazem a parametrização do caminho pelo parâmetro homotópico, mas também pode-se parametrizar o caminho pelo comprimento do arco, as quais serão descritas a seguir.

## 1 - Parametrização do Caminho pelo Parâmetro Homotópico

Para calcular a solução de:

$$f(x) = 0 \quad (\text{AVII.11})$$

voltamos ao sistema homotópico:

$$h(x, t) = t f(x) + (1 - t) g(x) = 0 \quad (\text{AVII.12})$$

$$h(x_0, 0) = g(x_0) = 0 \quad (\text{AVII.13})$$

$$h(x_N, 1) = f(x_N) = 0 \quad (\text{AVII.14})$$

$$t \in [0, 1] \quad (\text{AVII.15})$$

No método de Continuação Homotópica Clássica, o caminho homotópico é parametrizado pelo parâmetro  $t$ . De acordo com o teorema da função implícita isto só pode ser feito quando o  $D_x h$  é não singular em todo o caminho homotópico, ou seja, não apresenta sinuosidades ou ramificações, ver Figura AVII.1, o que restringe bastante o emprego deste método a casos de funções bem comportadas.

### **O Método da Continuação Numérica, Homotopia Clássica**

O método da continuação numérica, homotopia clássica, é resultado de um processo iterativo, onde o intervalo de  $t \in [0, 1]$  é dividido em  $N$  partes com  $(t_{i+1} - t_i) = 1/N$  para  $i = 0, 1, \dots, N-1$ ,  $t_0 = 0$  e  $t_N = 1$ . O processo tem início com a especificação de  $x_0$  para  $t_0$ . Na etapa seguinte, o novo valor de  $t$  é calculado por:

#### **Etapa de Predição**

$$t_{i+1} = t_i + 1/N \quad (\text{AVII.16})$$

$$i = 0, \dots, N-1 \quad (\text{AVII.17})$$

$$t_0 = 0 \text{ e } t_N = 1 \quad (\text{AVII.18})$$



Então emprega-se o método de Newton-Raphson para solucionar  $h(x_i, t_{i+1}) = 0$ , usando como estimativa inicial  $x_0$ , a solução de  $h(x_0, t_0) = 0$ , onde  $x_0$  é a solução de  $g(x) = 0$ . Portanto:

### Etapa de Correção

$$x_{i+1} = x_i - \left[ \frac{\partial h(x, t)}{\partial x} \right]^{-1} \bigg|_{x_i, t_{i+1}} h(x_i, t_{i+1}) \quad (\text{AVII.19})$$

$$i = 0, \dots, N-1 \quad (\text{AVII.20})$$

$$x_0 = \text{chute inicial e } x_N = \text{a solução desejada} \quad (\text{AVII.21})$$

O algoritmo simplificado é apresentado a seguir.

### Algoritmo 1

- 1 – Número de intervalos  $N$ ,  $t_0 = 0$ ;
- 2 – Cálculo do perfil inicial –  $f(x_0)$ ;
- 3 – Enquanto  $t < 1$  faça  
     Início  
          $t_{i+1} = t_i + 1/N$ ;  
         Cálculo de  $h(x, t)$ ;  
         Cálculo do jacobiano de  $h(x, t)$ ;  
         Cálculo de  $x_{i+1}$  por Newton-Raphsonon;  
     Fim do bloco 3
- 4 – Correção do valor de  $x(t = 1)$  por Newton-Raphson  
     até que  $|x_{i+1} - x_i| \leq \text{tolerância}$
- 5 – Fim

Figura AVII.2 – Algoritmo Simplificado da Homotopia Clássica

### O Método da Continuação por Diferenciação, Homotopia Perpendicular ao Parâmetro $t$

O esforço computacional da metodologia anterior é muito grande e pode ser reduzido substancialmente convertendo a equação (AVII.12) em um Problema de Valor Inicial de uma Equação Diferencial Ordinária, mantendo o

caminho homotópico parametrizado pelo parâmetro  $t$ , isto é, considerando  $x = x(t)$  e derivando a equação (AVII.12) membro a membro em relação a  $t$ .

$$h(x, t) = t f(x) + (1 - t) g(x) = 0 \quad (\text{AVII.22})$$

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial x} \frac{dx(t)}{dt} + \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = 0 \quad (\text{AVII.23})$$

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial x} = t \frac{\partial f(x)}{\partial x} + (1 - t) \frac{\partial g(x)}{\partial x} \quad (\text{AVII.24})$$

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = f(x) - g(x) \quad (\text{AVII.25})$$

Portanto:

$$\left[ t \frac{\partial f(x)}{\partial x} + (1 - t) \frac{\partial g(x)}{\partial x} \right] \frac{dx}{dt} + [f(x) - g(x)] = 0 \quad (\text{AVII.26})$$

Resultando assim no seguinte Problema de Valor Inicial:

$$\frac{dx}{dt} = \left[ t \frac{\partial f(x)}{\partial x} + (1 - t) \frac{\partial g(x)}{\partial x} \right]^{-1} [f(x) - g(x)] \quad (\text{AVII.27})$$

$$x(0) = x_0 \quad (\text{AVII.28})$$

A equação (AVII.27) pode ser resolvida por um método numérico específico, como o método de Gear, ou algum Runge Kutta de ordem alta.

A curva de  $x = x(t)$  deve ser a solução do problema de valor inicial. Esta integração pode ser realizada utilizando-se qualquer técnica numérica de integração como foi dito. Se o método de Euler for utilizado para resolver a integração para uma variação do parâmetro  $t$ ,  $\Delta t$ , então:

$$x_{t+\Delta t} = x_t + \frac{dx}{dt} \Delta t \quad (\text{AVII.29})$$

Após a etapa de integração numérica executada para o passo  $\Delta t$ , o vetor  $x_{t+\Delta t}$  pode ser corrigido para um valor mais próximo da solução final usando o método de Newton-Raphson ou uma de suas variações.

Para valores de  $t$ , onde  $0 \leq t < 1$ , a etapa de correção é executada para uma tolerância mil vezes maior que a tolerância final admitida.

Para  $t = 1$ , a etapa de correção é executada tantas vezes quanto forem necessárias até que o erro  $|x_{i+1} - x_i|$  seja menor ou igual à tolerância permitida. Esta é a forma do método de predição-correção.

Para o caso da Homotopia de Newton:

$$g(x) = f(x) - f(x_0) \quad (\text{AVII.30})$$

A equação (AVII.27) fica da seguinte forma:

$$\frac{dx}{dt} = - \left[ \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right]^{-1} f(x_0) \quad (\text{AVII.31})$$

$$x(0) = x_0 \quad (\text{AVII.32})$$

Com isto gera-se um algoritmo de predição-correção mais eficiente que o método da Continuação Homotópica Clássica, cujas etapas detalha-se a seguir:

### Etapa de Predição

O sistema de equações diferenciais ordinárias é resolvido de  $t_k$  a  $t_{k+1}$  usando um método simples, por exemplo o método de Euler, pois um algoritmo mais sofisticado não compensa nesta etapa, então:

$$t_{k+1} = t_k + \Delta t \quad (\text{AVII.33})$$

$$\frac{dx(x_k, t_k)}{dt} = - \left[ \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right]^{-1} \bigg|_{x_k} f(x_0) \quad (\text{AVII.34})$$

$$x_{p,k+1} = x_k + \frac{dx(x_k, t_k)}{dt} \Delta t \quad (\text{AVII.35})$$

$$k = 0, \dots, N-1 \quad (\text{AVII.36})$$

$$t_0 = 0 \text{ e } t_N = 1 \quad (\text{AVII.37})$$

onde  $x_{p,k+1}$  é o valor de  $x$  predito na interação  $(k+1)$ .

O valor de  $x_{p,k+1}$  é melhorado aplicando uma interação do método de Newton-Raphson à equação da homotopia:

$$h(x, t) = t f(x) + (1 - t) g(x) = 0 \quad (\text{AVII.38})$$

utilizando  $x_{p,k+1}$ ,  $t_{k+1}$  como estimativas iniciais, assim resolve-se o sistema:

$$x_{c,k+1} = x_{p,k+1} - \left[ \frac{\partial h(x_{p,k+1}, t_{k+1})}{\partial x} \right]^{-1} h(x_{p,k+1}, t_{k+1}) \quad (\text{AVII.39})$$

No caso da Homotopia de Newton:

$$g(x) = f(x) - f(x_0) \quad (\text{AVII.40})$$

$$h(x, t) = t f(x) + (1 - t) g(x) = f(x) - (1 - t) f(x_0) \quad (\text{AVII.41})$$

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial x} = \frac{\partial f(x)}{\partial x} \quad (\text{AVII.42})$$

### Etapa de Correção

$$x_{c,k+1} = x_{p,k+1} - \left[ \frac{\partial f(x_{p,k+1})}{\partial x} \right]^{-1} [f(x_{p,k+1}, t_{k+1}) - (1 - t_{k+1}) f(x_0)] \quad (\text{AVII.43})$$

$$x_{k+1} = x_{p,k+1} \quad (\text{AVII.44})$$

Repete-se uma nova etapa predição-correção até  $t = 1$ .

A seguir apresenta-se um resumo do algoritmo descrito anteriormente.

### Algoritmo 2

- 1 – Leitura de  $\Delta t$ ,  $t_0 = 0$ ;
- 2 – Cálculo do perfil inicial –  $f(x_0)$ ;
- 3 – Cálculo do jacobiano –  $J(x_0)$
- 4 – Enquanto  $t < 1$  faça  
     Início  
         Cálculo de  $h(x,t)$ ;  
         Cálculo do jacobiano de  $h(x,t)$ ;  
         Predição de  $x_{p,k+1}$  por Euler;  
         Correção de  $x_{p,k+1}$  por Newton-Raphson  $\Rightarrow x_{c,k+1}$ ,  
          $x_{k+1} = x_{c,k+1}$ ;  
     Fim do bloco 3
- 4 - Correção do valor de  $x(t = 1)$  por Newton-Raphson até que  
      $|x_{i+1} - x_i| \leq \text{tolerância}$
- 5 – Fim

Figura AVII.3 - Algoritmo Simplificado da Homotopia  
Perpendicular ao Parâmetro  $t$

Nos casos onde aparecem sinuosidades, este algoritmo, como o método da Continuação Homotópica Clássica, falham devido à singularidade do jacobiano e ao fato de que este algoritmo não prevê redução em  $t$  de forma a seguir o caminho homotópico.

Para superar esta dificuldade adota-se como variável independente do sistema o comprimento do arco,  $p$ , que por ser sempre não nulo não apresenta pontos de singularidade.

## 2 - Parametrização do Caminho pelo Comprimento do Arco

### O Método da Continuação por Diferenciação, Homotopia Perpendicular ao Parâmetro $v$

Para contornar algumas das desvantagens dos métodos clássicos de continuação as variáveis  $x$  e  $t$  são determinadas como funções de  $p$ ; o comprimento do arco do caminho homotópico, ver Figura AVII.1 para o caso unidimensional, que é dado por:

$$\Delta p \cong \sqrt{\sum_{i=1}^n (\Delta x_i)^2 + (\Delta t)^2} \quad (\text{AVII.45})$$

E infinitesimalmente:

$$dp^2 = \sum_{i=1}^n dx_i^2 + dt^2 \quad (\text{AVII.46})$$

$$1 = \sum_{i=1}^n \left( \frac{dx_i}{dp} \right)^2 + \left( \frac{dt}{dp} \right)^2 \quad (\text{AVII.47})$$

Retornando ao problema da Continuação Homotópica, deriva-se a equação homotópica, (AVII.22), em relação a  $p$ :

$$\left\{ t D_x f[x(p)] + (1-t) D_x g[x(p)] \right\} \frac{dx(p)}{dp} + \left\{ f[x(p)] - g[x(p)] \right\} \frac{dt(p)}{dp} = 0 \quad (\text{AVII.48})$$

Este sistema representa  $n$  equações e  $(n+1)$  incógnitas, os  $\frac{dx(p)}{dp}$  e  $\frac{dt(p)}{dp}$ .

Considerando, adicionalmente, como  $(n+1)$ -ésima equação, a equação (AVII.47), temos um sistema determinado. Chamemos o vetor solução de (AVII.48) de  $V$ :

$$V \in \mathbb{R}^{n+1} \text{ tal que } \begin{cases} V_i = \frac{dx_i}{dp}, \text{ para } i = 1, \dots, n \\ V_{n+1} = \frac{dt}{dp} \end{cases}$$

Da equação (AVII.47) nota-se que a norma euclidiana de  $V$  é:

$$\|V\| = 1 \quad (\text{AVII.49})$$

Para determinar  $V$  utiliza-se um vetor  $U$  paralelo a  $V$ :

$$U = \pm \|U\| V \quad (\text{AVII.50})$$

Portanto, pode-se escrever a equação (AVII.48) da seguinte forma:

$$\{ t D_x f[x(p)] + (1-t) D_x g[x(p)] \} U_n + \{ f[x(p)] - g[x(p)] \} U_{n+1} = 0 \quad (\text{AVII.51})$$

Arbitra-se uma componente de  $U$  como sendo unitária e obtém-se as demais resolvendo o sistema acima, equação (AVII.51). A componente de  $U$  deve ser arbitrada de modo que a matriz a ser invertida seja não-singular. A seguir calculamos  $\|U\|$ , e logo a seguir  $V$  por:

$$V_i(p) = \pm \frac{U_i}{\|U\|} \quad (\text{AVII.52})$$

Escolhendo o sinal (+) ou (-) de forma que o ângulo formado entre o vetor  $V$  atual e o vetor  $V$  do passo anterior seja agudo, ( $\leq \pi/2$ ), isto é:

$$V^k \cdot V^{k-1} \geq 0 \quad (\text{AVII.53})$$

Caso  $k=1$ , adota-se  $U_{n+1} = 1$  e  $V$  no mesmo sentido de  $U$  (sinal positivo), o que equivale a dizer que no primeiro passo caminha-se na direção de  $t$  crescente.

Este sistema pode ser resolvido de forma ligeiramente mais complexa que o anterior, com duas etapas, por iteração.

### **Etapa de Predição**

Consiste na integração numérica do caminho homotópico, a partir das derivadas em relação ao comprimento do arco:

$$x^k = x^{k-1} + h \frac{dx^k}{dp} \quad (\text{AVII.54})$$

$$t^k = t^{k-1} + h \frac{dt^k}{dp} \quad (\text{AVII.55})$$

No caso acima está representado o método de Euler, sendo relatado na literatura o uso de métodos mais sofisticados, o que constitui uma complicação adicional que normalmente não se justifica. Para que esta integração seja feita deve-se conhecer  $V$ . Para tanto, parte-se do sistema linear com  $(n+1)$  incógnitas e  $n$  equações:

$$\{ t D_x f[x(p)] + (1-t) D_x g[x(p)] \}^{k-1} U_n^k + \{ f[x(p)] - g[x(p)] \}^{k-1} U_{n+1}^k = 0 \quad (\text{AVII.56})$$

e arbitra-se um componente de  $U^k$  ( $= 1$ ), de modo que a matriz do sistema linear resultante seja não-singular, calculando-se então as demais componentes (isto só será possível se o rank de  $D_x H$  for igual a  $n$ , isto é, apenas uma coluna da matriz do sistema é linearmente dependente das restantes, sendo o índice desta coluna o mesmo índice da componente a ser arbitrado).

A fim de reparametrizar o sistema, isto é, escolher a componente de  $U$  que é arbitrada de modo a evitar singularidades, seleciona-se a variável que teve a maior taxa de variação no passo anterior, isto é, maior componente do vetor  $V$  e a escolhe na iteração atual.

Conhecido  $U^k$  obtém-se:

$$\|U^k\| = \sqrt{U_1^2 + U_2^2 + \dots + U_n^2 + U_{n+1}^2} \quad (\text{AVII.57})$$

e, a seguir:

$$V_i^k = \pm \frac{U_i^k}{\|U^k\|} \quad i = 1, 2, \dots, n+1 \quad (\text{AVII.58})$$

sendo que o  $V^k$  tem mesma direção de  $U^k$  (sinal positivo) quando:

$$V^K \cdot V^{k-1} \geq 0 \quad (\text{AVII.59})$$

Então é dado um passo pelo método de Euler, na direção do vetor unitário, calculando-se os valores de  $x$  e  $t$  ao final desta etapa:



$$\begin{cases} x_{p,i}^k = x_i^{k-1} + h V_i^k & i = 1, 2, \dots, n \\ t_p^k = t^{k-1} + h V_{n+1}^k \end{cases} \quad (\text{AVII.60})$$

### **Etapas de Correção**

Aqui novamente é empregado o método de Newton-Raphson e, como se está interessado na determinação precisa do valor do caminho homotópico apenas quando  $t = 1$ , só realiza-se uma iteração por passo. Caso se deseje-se uma determinação precisa do caminho homotópico, efetua-se as iterações de Newton-Raphson até ser atendida uma condição de convergência para cada etapa de correção. Pode-se aplicar a correção do método de Newton-Raphson em duas direções distintas:

#### **Direção Perpendicular ao Eixo t:**

Neste caso mantém-se  $t$  constante e igual a  $t_p^k$ , calculando  $x^k$  aplicando uma iteração do método de Newton-Raphson à  $H[x,t]$ , com  $x = x_p^k$ ,  $t = t_p^k$ .

Após resolver este sistema obtém-se:

$$\Delta x^k = - \left[ D_x H(x_p^k, t_p^k) \right]^{-1} H(x_p^k, t_p^k) \quad (\text{AVII.61})$$

e

$$x^k = x_p^k + \Delta x^k \quad (\text{AVII.62})$$

$$t^k = t_p^k \quad (\text{AVII.63})$$

#### **Direção Perpendicular ao Vetor Tangente v:**

Neste caso resolve-se o sistema:

$$\left[ \begin{array}{c|c} D_x H(x_p^k, t_p^k) & f(x_p^k) - g(x_p^k) \\ \hline & (V^k)^T \end{array} \right] \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -H(x_p^k, t_p^k) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{AVII.64})$$

Assim, após resolver este sistema linear, obtém-se:

$$x^k = x_p^k + \Delta x^k \quad (\text{AVII.65})$$

$$t^k = t_p^k + \Delta t^k \quad (\text{AVII.66})$$

Portanto, repete-se as etapas de predição-correção até  $t = 1$ , e então por último, aplica-se o método de Newton-Raphson até atingir a convergência desejada.

Mais detalhes sobre os métodos de Homotopia apresentados consultar as seguintes referências: Kubicek e Hlavacek (1983), Kubicek e Merek (1983), Hlavacek e Van Rompay (1985), Vickery e Taylor (1986), Kovack e Seider (1987), Lin et al. (1987), Wayburn e Seader (1987), Kuno e Seader (1988), Rion e Van Brunt (1990), Seader et al. (1990), , Lopes (1990), Freitas (1992), Soares (1992) e Silva (1992),.

### Função Objetivo

A conexão entre a minimização de uma função de  $R^n$  para  $R$  e a solução de um sistema de equações algébricas não-lineares é devido ao fato que um sistema da seguinte forma:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{AVII.67})$$

têm a solução em  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$  precisamente quando a função  $g$  definida por:

$$g(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n [f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)]^2 \quad (\text{AVII.68})$$

têm um valor mínimo de zero.

Esta metodologia permite encontrar a solução de um sistema de equações algébricas não-lineares utilizando um algoritmo de otimização com a função objetivo definida pela equação (AVII.68). Utilizando um chute o qual o método de Newton-Raphson não converge, este método pode convergir, embora seja mais lento. O método de otimização utilizado neste trabalho foi o do Levenberg Marquart com/sem restrições do “software” IMSL.

Mais detalhes consultar Burden e Faires (1989) e Silva (1992).

## APÊNDICE VIII

### Algoritmo Clássico

A equação do controlador PID analógico mais utilizado é:

$$u(t) = K_c \left[ e(t) + \frac{1}{T_I} \int_0^t e(t) dt + T_D \frac{de(t)}{dt} \right] \quad (\text{AVIII.1})$$

onde:

$K_c$  = ganho proporcional;

$T_I$  = tempo integral;

$T_D$  = tempo derivativo;

$e(t)$  = “set point” – variável controlada.

Para pequenos tempos de amostragem,  $T_A$ , esta equação pode ser transformada em uma equação de diferenças por discretização.

A derivada é simplesmente aproximada por uma diferença de primeira ordem, e o termo integral é aproximado utilizando integração trapezoidal. A equação (AVIII.1) toma a seguinte forma:

$$u(k) = K_c \left\{ e(k) + \frac{T_A}{T_I} \left[ \frac{e(0) + e(k)}{2} + \sum_{i=1}^{k-1} e(i) \right] + \frac{T_D}{T_A} [e(k) - e(k-1)] \right\} \quad (\text{AVIII.2})$$

A equação (AVIII.2) é um algoritmo não-recursivo, conhecido como algoritmo de posição. Entretanto, algoritmos recursivos são mais apropriados para programação em computadores e caracterizam-se pelo cálculo da variável manipulada corrente,  $u(k)$ , baseada na variável manipulada passada,  $u(k-1)$ , e termos de correção.

Para derivar o algoritmo recursivo, tem-se que subtrair da equação (AVIII.2) a seguinte equação:

$$u(k-1) = K_c \left\{ e(k-1) + \frac{T_A}{T_I} \left[ \frac{e(0) + e(k-1)}{2} + \sum_{i=1}^{k-2} e(i) \right] + \frac{T_D}{T_A} [e(k-1) - e(k-2)] \right\} \quad (\text{AVIII.3})$$

Chega-se assim à forma recursiva, conhecida como algoritmo de velocidade, equação (VI.2):

$$u(k) = u(k-1) + q_0 e(k) + q_1 e(k-1) + q_2 e(k-2) \quad (\text{AVIII.4})$$

onde:

$$q_0 = K_c \left[ 1 + \frac{T_A}{2T_I} + \frac{T_D}{T_A} \right] \quad (\text{AVIII.5})$$

$$q_1 = -K_c \left[ 1 - \frac{T_A}{2T_I} + \frac{2T_D}{T_A} \right] \quad (\text{AVIII.6})$$

$$q_2 = \frac{K_c T_D}{T_A} \quad (\text{AVIII.7})$$

Mais detalhes consultar: Stephanopoulos (1984), Smith e Corripio (1985), Seborg et al. (1989), Isermann (1989), Ender (1990), Toledo (1992) e Souza (1993).

## APÊNDICE IX

### Algoritmos Preditivos e Adaptativo

#### AIX.1 - Estratégia de Controle

Controladores do tipo preditivo empregam um modelo matemático para representar o processo físico real a ser controlado.

Os parâmetros do modelo podem ser considerados invariantes no tempo, ou identificados “on-line”, no caso de uma versão auto-ajustável.

Estes controladores utilizam valores das saídas do processo e ações de controle passadas em sua estratégia de controle, como apresentada na Figura IX.1.

A seguinte estratégia de controle foi utilizada:

- 1-) a cada tempo de amostragem  $t$  (a partir de agora,  $t$  representa o tempo de amostragem), são feitas previsões das saídas do modelo do processo ao longo de um horizonte de tempos de amostragem. Estas previsões são funções do modelo interno assumido, dos vetores de ações de controle e saídas do processo passadas, assim como do vetor de ações de controle futuras potenciais;
- 2-) o comportamento da planta em malha fechada é definido por uma trajetória de referência, sendo esta um modelo de primeira ordem, não indicada na figura;
- 3-) o vetor de ações de controle futuras é calculado de modo que a diferença entre a saída predita do modelo e a trajetória de referência seja minimizada. Alguns algoritmos como DMC e GPC, consideram a restrição de que, após um “horizonte de controle”, os incrementos na ação de controle são nulos;
- 4-) só a primeira ação de controle calculada é aplicada à planta, de modo que erros de modelagem e presença de perturbações sejam considerados;
- 5-) o procedimento completo é repetido no tempo de amostragem seguinte e os vetores de dados são atualizados, levando ao cálculo de uma ação de controle baseada nas últimas medidas.

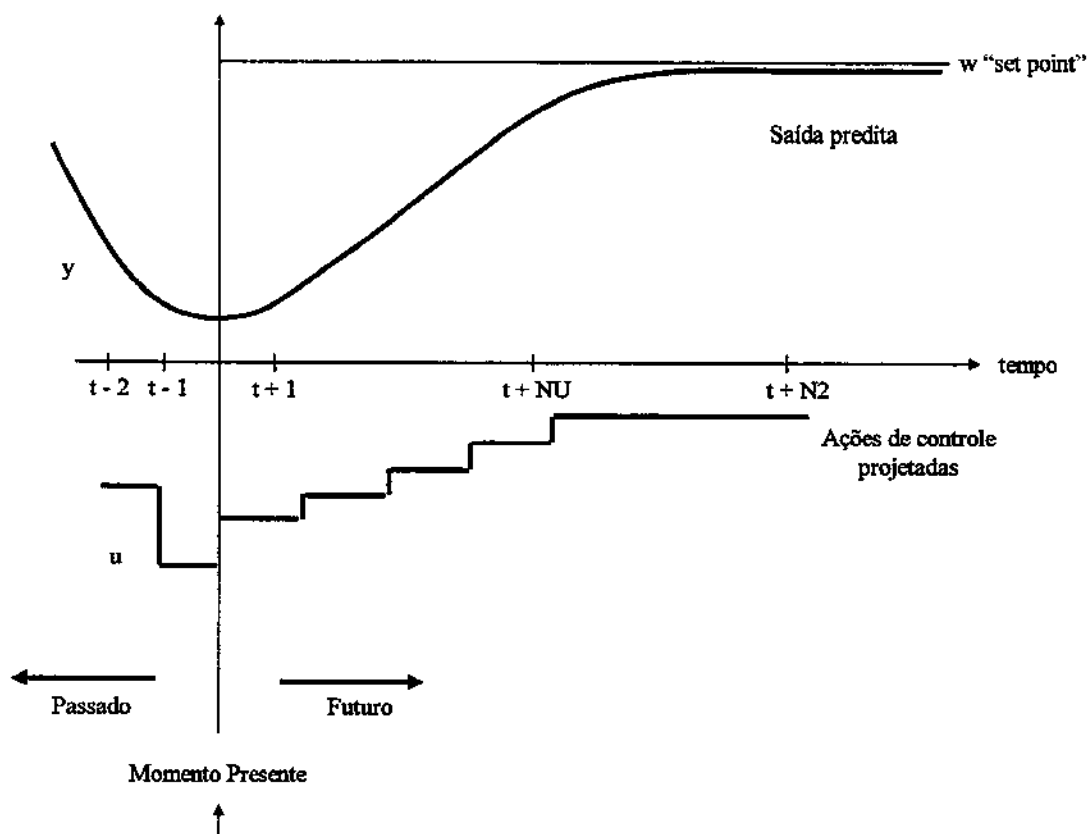


Figura IX.1 - Estratégia de Predição de Longo Alcance

## AIX.2 - Modelo Interno

Os controladores preditivos utilizam-se de um modelo interno do processo real para o cálculo da predição de longo alcance. O termo “interno” refere-se ao fato deste modelo estar dentro da lei de controle, na formulação do controlador.

Diferentes modelos são utilizados para este fim, sendo os mesmos divididos em dois grupos: não paramétricos e paramétricos.

Seja a figura a seguir:

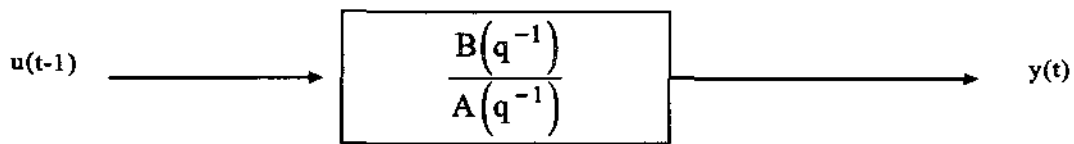


Figura IX.2 - Modelo de Entrada e Saída

Admitindo-se um modelo linearizado em torno de um ponto de operação, a representação pela equação de diferenças é:

$$A(q^{-1}) y(t) = B(q^{-1}) u(t-1) \quad (\text{AIX.1})$$

onde  $A(q^{-1})$  e  $B(q^{-1})$  são polinômios dados por:

$$A(q^{-1}) = 1 + a_1 q^{-1} + \dots + a_{na} q^{-na};$$

$$B(q^{-1}) = q^{-t_d} (b_0 + b_1 q^{-1} + \dots + b_{nb} q^{-nb}).$$

onde  $q^{-1}$  é o operador deslocamento,  $q^{-1}y(t) = y(t-1)$ ,  $na$  e  $nb$  são as ordens de  $A(q^{-1})$  e  $B(q^{-1})$ , respectivamente, e  $t_d$  é o tempo morto do processo.

Adotado por certos controladores preditivos, este modelo, chamado DARMA ("Deterministic Auto-Regressive and Moving Average"), é do tipo entrada-saída, e supõe que todas as variações na variável controlada,  $y(t)$ , sejam resultado da ação de controle,  $u(t)$ .

Outro modelo interno muito utilizado pelos primeiros algoritmos preditivos, o modelo que se baseia na resposta impulsional do processo pode ser obtido da equação (AIX.1) pela relação:

$$y(t) = H(q^{-1})u(t) \quad (\text{AIX.2})$$

$$H(q^{-1}) = A(q^{-1})^{-1} B(q^{-1}) \quad (\text{AIX.3})$$



Esta forma envolve um número infinito de termos, sendo representada por uma convolução discreta:

$$y(t) = \sum_{i=1}^{\infty} h_i u(t-i) \quad (\text{AIX.4})$$

Assumindo que  $h_i = 0$ , após um número  $N$  de amostras, a equação (AIX.4) passa a ter uma representação finita dada por:

$$y(t) = \sum_{i=1}^N h_i u(t-i) \quad (\text{AIX.5})$$

Os coeficientes  $h_i$  podem, na prática, serem determinados por caminhos alternativos. Originalmente no DMC, a proposta era a de determiná-los através das ordenadas da resposta a um degrau. Parece mais correto que sejam determinadas a partir da função de transferência obtida via qualquer método de identificação.

Os modelos apresentados até agora supõem que todas as variações da saída do processo,  $y(t)$ , são explicadas pela ação de controle. As aplicações práticas mostram que, mesmo com ações de controle constantes, a saída do processo continua flutuando, Souza Júnior (1989). Isto ocorre, não somente devido às perturbações determinísticas, mas também a uma série de flutuações estocásticas. Portanto, serão mais realistas os modelos do tipo:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t-1) + x(t) \quad (\text{AIX.6})$$

onde  $x(t)$  é o termo de perturbação estocástica.

Segundo Clarke et al. (1987a, 1987b), são encontrados dois tipos de perturbações principais: sinais randômicos, ocorrendo em tempos randômicos, e movimento Browniano.

Em ambos os casos, o modelo utilizado para representação do termo perturbação é dado por:

$$x(t) = C(q^{-1}) \frac{\xi(t)}{\Delta} \quad (\text{AIX.7})$$

onde:

$$C(q^{-1}) = 1 + c_1 q^{-1} + \dots + c_{nc} q^{-nc};$$

$$\Delta = 1 - q^{-1}$$

nc = ordem do polinômio  $C(q^{-1})$ .

O ruído branco  $\xi(t)$  é um sinal completamente não correlacionado, considerando-o aqui como tendo distribuição de amplitude gaussiana e, sendo assim, totalmente descrito pela sua média e covariância, Souza Júnior (1989).

Substituindo a equação (AIX.7) na equação (AIX.6), tem-se:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t-1) + C(q^{-1})\frac{\xi(t)}{\Delta} \quad (\text{AIX.8})$$

Este modelo, conhecido como CARIMA ("Controlled Auto-Regressive Integrated Moving Average"), é utilizado por Clarke et al. (1987a, 1987b), e está representado na Figura AIX.4

Chamando-se o ruído filtrado de  $\eta(t)$ :

$$\eta(t) = \frac{\xi(t)}{\Delta} \quad (\text{AIX.9})$$

que pode ser escrito:

$$\eta(t) = \eta(t-1) + \xi(t) \quad (\text{AIX.10})$$

Para as características descritas de  $\xi(t)$ , pode-se considerar  $\eta(t)$  como movimento Browniano, Ender (1990).

Valendo-se da idéia de Souza Júnior (1989), que propôs uma alteração do modelo interno, chegou-se a um algoritmo de controle com ação integral variável, cujo termo perturbação é dado por:

$$x(t) = \frac{C(q^{-1})\xi(t)\left[1 - (1-\beta)q^{-1}\right]}{\Delta} \quad (\text{AIX.11})$$

Onde  $0 \leq \beta \leq 1$

No caso de  $\beta = 1$ , obtém-se o modelo CARIMA e, para  $\beta = 0$ , tem-se o modelo CARMA, que não proporciona ação integral ao algoritmo, e cuja representação se encontra na Figura AIX.3.

Substituindo a equação (AIX.11) na equação (AIX.6), tem-se o modelo interno utilizado no algoritmo GPC:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t-1) + \frac{C(q^{-1})\xi(t)\left[1 - (1-\beta)q^{-1}\right]}{\Delta} \quad (\text{AIX.12})$$

Observa-se que os modelos CARMA, CARIMA e o proposto pela equação (AIX.12) são modelos paramétricos e o dado pela equação (AIX.5) é um modelo não paramétrico.

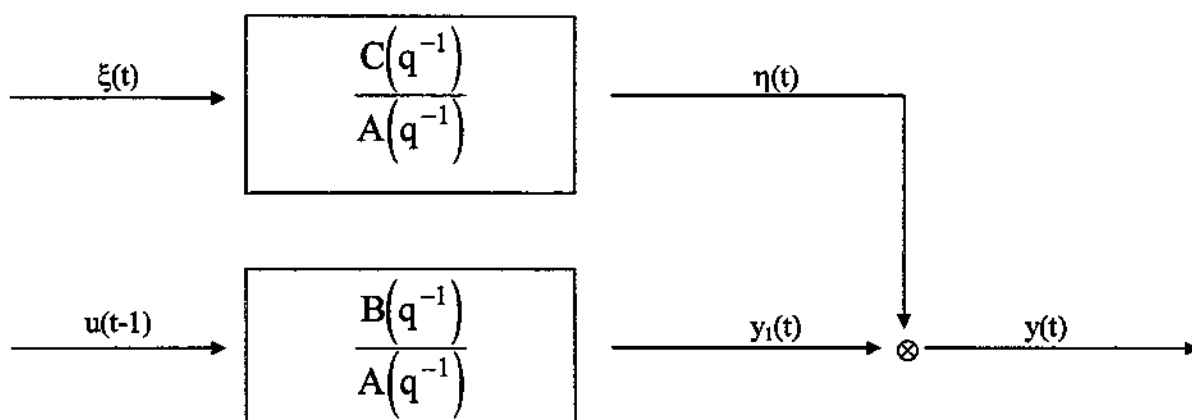


Figura AIX.3 - Modelo CARMA

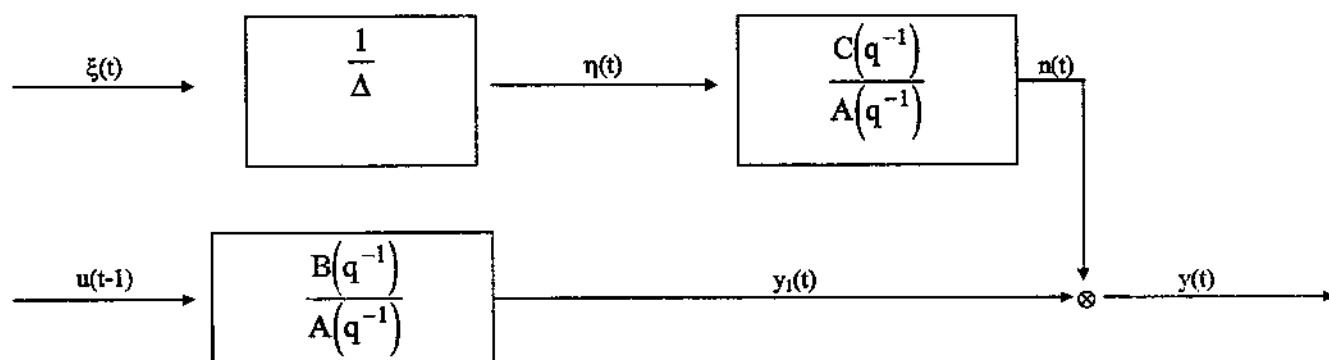


Figura AIX.4 - Modelo CARIMA

### AIX.3 - DMC

O desenvolvimento matemático do algoritmo DMC apresentado a seguir para o caso monovariável e multivariável segue a metodologia descrita por Desphande (1985) e Pinto (1990).

#### AIX.3.1 - DMC Monovariável

##### AIX.3.1.1 - Previsão Simples

O DMC é baseado na compensação do processo predito por um modelo de convolução discreto, onde a variável de saída se relaciona com a variável de entrada ao longo do tempo. Para o instante  $k$ :

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^{\infty} h_i \cdot u_{k-i} \quad (\text{AIX.13})$$

Considerando-se uma representação finita, fazendo  $h_i = 0$  para  $i > N$ , sendo  $N$  um número finito de intervalos de amostragem. Assim para o instante  $k$ :

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^N h_i \cdot u_{k-i} \quad (\text{AIX.14})$$

Pode-se escrever para o instante  $k + 1$ :

$$\hat{y}_{k+1} = \sum_{i=1}^N h_i \cdot u_{k+1-i} \quad (\text{AIX.15})$$

Subtraindo a equação (AIX.14) da equação (AIX.15):

$$\hat{y}_{k+1} - \hat{y}_k = \sum_{i=1}^N h_i \cdot (u_{k+1-i} - u_{k-i}) \quad (\text{AIX.16})$$

Definindo:

$$\Delta u_k = u_k - u_{k-1} \quad (\text{AIX.17})$$

A expressão (AIX.16) se torna:

$$\hat{y}_{k+1} = \hat{y}_k + \sum_{i=1}^N h_i \cdot \Delta u_{k+1-i} \quad (\text{AIX.18})$$

O modelo acima deve sofrer correções, incorporando uma estratégia de realimentação. No instante anterior, o valor predito de saída é comparado ao valor medido, sendo o desvio usado para correção no instante atual:

$$\hat{y}_{k+1}^c = \hat{y}_{k+1} + (y_k - \hat{y}_k) \quad (\text{AIX.19})$$

O valor desejado para a saída no instante  $k + 1$  é especificado na forma de uma trajetória, que é admitida de primeira ordem. Esta representação do valor desejado é equivalente a um filtro de primeira ordem e não constava da estratégia inicial do DMC, sendo incorporada da estratégia MAC.

O parâmetro  $\alpha$  determina o quão rápido a trajetória atinge o “set point”  $y_{spk}$ :

$$y_{k+1}^d = \alpha \cdot y_k + (1 - \alpha) \cdot y_{spk} \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (\text{AIX.20})$$

O objetivo é que se tenha:

$$y_{k+1}^c = y_{k+1}^d \quad (\text{AIX.21})$$

Substituindo as equações (AIX.19) e (AIX.20) em (AIX.21):

$$\hat{y}_{k+1} + y_k - \hat{y}_k = \alpha \cdot y_k + (1 - \alpha) \cdot y_{spk} \quad (\text{AIX.22})$$

$$\hat{y}_{k+1} - \hat{y}_k = (1 - \alpha) \cdot e_k \quad (\text{AIX.23})$$

onde:

$$e_k = y_{spk} - y_k \quad (\text{AIX.24})$$

Utilizando o modelo de convolução, dado por (AIX.18), tem-se:

$$\sum_{i=1}^N h_i \cdot \Delta u_{k+1-i} = (1 - \alpha) e_k \quad (\text{AIX.25})$$

A ação de controle (variável manipulada) é determinada no instante  $k$ , rearranjando-se a expressão (AIX.25):

$$\Delta u_k = u_k - u_{k-1} = \frac{(1 - \alpha)}{h_1} \cdot e_k - \frac{1}{h_1} \cdot \sum_{i=2}^N h_i \cdot \Delta u_{k+1-i} \quad (\text{AIX.26})$$

### AIX.3.1.2 - Precisão Múltipla

Na seção AIX.3.1.1, a saída do processo era predita para apenas o primeiro instante no futuro e a variável manipulada determinada de modo que a resposta calculada fosse igual a desejada. Nesta seção, a resposta será predita em  $R$  instantes futuros e as ações de controle serão calculadas com o fim de minimizar as diferenças entre a resposta e a trajetória desejada.

O modelo de convolução, equação (AIX.18), pode ser estendido para  $R$  instantes futuros:

$$\hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1} + \sum_{i=1}^N h_i \cdot \Delta u_{k+j-i} \quad j=1, \dots, R \quad (\text{AIX.27})$$

Analogamente à seção anterior, o modelo é corrigido:

$$y_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j} + \left( y_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1} \right) \quad j=1, \dots, R \quad (\text{AIX.28})$$

onde:

$$y_k^c = y_k \quad (\text{AIX.29})$$

Combinando as equações (AIX.27) e (AIX.28), chega-se a:

$$y_{k+j}^c = y_{k+j-1}^c + \sum_{i=1}^N h_i \cdot \Delta u_{k+j-i} \quad j=1, \dots, R \quad (\text{AIX.30})$$

Para o instante (k+1):

$$y_{k+1}^c = y_k^c + \sum_{i=1}^N h_i \cdot \Delta u_{k+1-i} = y_k + \sum_{i=1}^N h_i \cdot \Delta u_{k+1-i} \quad (\text{AIX.31})$$

$$y_{k+1}^c = y_k + h_1 \cdot \Delta u_k + h_2 \cdot \Delta u_{k-1} + \dots + h_N \cdot \Delta u_{k+1-N}$$

Os valores  $\Delta u_{k-1}$ ,  $\Delta u_{k-2}$ , ...,  $\Delta u_{k-N}$  são conhecidos. Agrupando-se num único termo, tem-se:

$$S_1 = \sum_{i=2}^N h_i \cdot \Delta u_{k+1-i} \quad (\text{AIX.32})$$

Portanto, a equação (AIX.31) se torna:

$$y_{k+1}^c = y_k + h_1 \cdot \Delta u_k + S_1 \quad (\text{AIX.33})$$

Repetindo o procedimento para (k+2):

$$y_{k+2}^c = y_{k+1}^c + \sum_{i=1}^N h_i \cdot \Delta u_{k+2-i} \quad (\text{AIX.34})$$

$$y_{k+2}^c = y_{k+1}^c + h_1 \cdot \Delta u_{k+1} + h_2 \cdot \Delta u_k + \dots + h_N \cdot \Delta u_{k+2-N}$$

Agrupando-se novamente os valores conhecidos num único termo:

$$S_2 = \sum_{i=3}^N h_i \cdot \Delta u_{k+2-i} \quad (\text{AIX.35})$$

Chega-se a:

$$y_{k+2}^c = y_{k+1}^c + h_1 \cdot \Delta u_{k+1} + h_2 \cdot \Delta u_k + S_2 \quad (\text{AIX.36})$$

Substituindo (AIX.33) em (AIX.36):



$$y_{k+2}^c = y_k + (h_1 + h_2)\Delta u_k + h_1 \cdot \Delta u_{k+1} + S_1 + S_2 \quad (\text{AIX.37})$$

Analogamente, para  $(k+3)$ :

$$y_{k+3}^c = y_k + (h_1 + h_2 + h_3)\Delta u_k + (h_1 + h_2)\Delta u_{k+1} + h_1 \cdot \Delta u_{k+2} + S_1 + S_2 + S_3 \quad (\text{AIX.38})$$

onde:

$$S_3 = \sum_{i=4}^N h_i \cdot \Delta u_{k+3-i} \quad (\text{AIX.39})$$

Portanto, definindo genericamente os seguintes termos:

$$P_i = \sum_{m=1}^i S_m \quad i = 1, \dots, R \quad (\text{AIX.40})$$

$$S_m = \sum_{i=m+1}^N h_i \cdot \Delta u_{k+m-i} \quad m = 1, \dots, R \quad (\text{AIX.41})$$

$$a_i = \sum_{j=1}^i h_j \quad i = 1, \dots, R \quad (\text{AIX.42})$$

Para o instante  $k+j$ :

$$y_{k+j}^c = y_k + a_j \cdot \Delta u_k + a_{j-1} \cdot \Delta u_{k+1} + \dots + a_1 \cdot \Delta u_{k+j-1} + P_j \quad (\text{AIX.43})$$

Escrevendo a equação (AIX.43) na forma vetor-matriz para os  $R$  instantes futuros, tem-se que:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+R-1}^c \\ y_{k+R}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_2 & a_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{R-1} & a_{R-2} & \cdots & a_1 & 0 \\ a_R & a_{R-1} & \cdots & a_2 & a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+R-2} \\ \Delta u_{k+R-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{R-1} \\ y_k + P_R \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.44})$$

Sendo a trajetória dada por:

$$y_{k+j}^d = \alpha_j \cdot y_k + (1 - \alpha_j) y_{sp_k} \quad (\text{AIX.45})$$

Na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^d \\ y_{k+2}^d \\ \vdots \\ y_{k+R-1}^d \\ y_{k+R}^d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & x & y_k + (1 - \alpha_1) & x & y_{sp_k} \\ \alpha_2 & x & y_k + (1 - \alpha_2) & x & y_{sp_k} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{R-1} & x & y_k + (1 - \alpha_{R-1}) & x & y_{sp_k} \\ \alpha_R & x & y_k + (1 - \alpha_R) & x & y_{sp_k} \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.46})$$

Subtraindo a equação (AIX.44) da equação (AIX.46), tem-se:

$$\underset{\sim}{E} = - \underset{\sim}{A'} \underset{\sim}{\Delta u} + \underset{\sim}{E'} \quad (\text{AIX.47})$$

onde  $\underset{\sim}{A'}$  e  $\underset{\sim}{\Delta u}$ , respectivamente, a matriz triangular  $R \times R$  e o vetor  $R$  - dimensional dados na expressão (AIX.44). Os demais vetores são definidos a seguir:

$$\underset{\sim}{E} = \begin{bmatrix} y_{k+1}^d - y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^d - y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+R-1}^d - y_{k+R-1}^c \\ y_{k+R}^d - y_{k+R}^c \end{bmatrix} \quad \underset{\sim}{E'} = \begin{bmatrix} (1 - \alpha_1) & x & e_k - P_1 \\ (1 - \alpha_2) & x & e_k - P_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (1 - \alpha_{R-1}) & x & e_k - P_{R-1} \\ (1 - \alpha_R) & x & e_k - P_R \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.48})$$

A definição de  $e_k$  é dada pela equação (AIX.24). É importante notar que  $\tilde{E}'$  é calculado com base nas ações passadas de controle e representa o desvio predito da saída com respeito à trajetória desejada. Porém, o cálculo de  $\tilde{E}'$  assume que não ocorrerão perturbações no intervalo  $[k; (k + R)]$ .

Se é requerido que saída predita seja igual à desejada, então:

$$\tilde{E} = 0 \quad \rightarrow \quad 0 = -\tilde{A}' \tilde{\Delta u} + \tilde{E}' \quad (\text{AIX.49})$$

Consequentemente:

$$\tilde{\Delta u} = (\tilde{A}')^{-1} \tilde{E}' \quad (\text{AIX.50})$$

A solução dada pela equação (AIX.50) é única, sendo obtida a partir de um sistema determinado; entretanto, é baseada na imposição de que a variável controlada seja igual à trajetória desejada ao longo do horizonte de controle, o que é, muitas vezes, fisicamente impossível.

A estratégia do DMC consiste em se obter um sistema indeterminado, reduzindo arbitrariamente a dimensão do vetor  $\tilde{\Delta u}$ . Admite-se que  $\Delta u_{k+j} = 0$  para  $j \geq L$ , sendo  $L < R$ . O sistema (AIX.44) passa a ser:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+R-1}^c \\ y_{k+R}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & a_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{R-1} & a_{R-2} & \cdots & a_{R-L} \\ a_R & a_{R-1} & \cdots & a_{R-L+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+L-2} \\ \Delta u_{k+L-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{R-1} \\ y_k + P_R \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.51})$$

A equação (AIX.47) pode ser escrita como:

$$\tilde{E} = -\tilde{A} \tilde{\Delta u} + \tilde{E}' \quad (\text{AIX.52})$$

onde  $\tilde{A}$  é chamada Matriz Dinâmica de dimensão  $R \times L$  e  $\tilde{\Delta u}$  o vetor de ações de controle, que aparecem na expressão (AIX.51). Nota-se que a matriz  $\tilde{A}$  é formada pelas primeiras  $L$  colunas de  $\tilde{A}'$ .

O sistema, que não apresenta uma única solução, deve ser resolvido segundo um critério de otimização. Segundo a estratégia original, a “melhor solução” é obtida por mínimos quadrados, minimizando o índice de performance quadrático:

$$J[\tilde{\Delta u}] = \tilde{E}^T \tilde{E} \quad (\text{AIX.53})$$

cuja solução é:

$$\tilde{\Delta u} = (\tilde{A}^T \tilde{A})^{-1} \tilde{A}^T \tilde{E}' \quad (\text{AIX.54})$$

São determinadas as ações de controle no intervalo  $[k; k+L-1]$ , porém somente  $\Delta u_k$  será implementada. No instante  $k + 1$  a equação (AIX.54) é utilizada novamente.

A equação (AIX.54) fornece a solução para o problema de otimização sem restrições. A lei de controle pode resultar em movimentos bruscos na variável manipulada. Define-se um índice de desempenho modificado que incorpore restrições de supressão, penalizando os movimentos da variável manipulada da seguinte forma:

$$J[\tilde{\Delta u}] = \tilde{E}^T \tilde{Q} \tilde{E} + \tilde{\Delta u}^T \tilde{R} \tilde{\Delta u} \quad (\text{AIX.55})$$

onde  $\tilde{Q}$  e  $\tilde{R}$  são matrizes positivas semi-definidas e diagonais. Nota-se que  $\tilde{Q}$  permite introduzir penalidades nos erros preditos.

A lei de controle resultante da função objetivo definida em (AIX.55) é dada por:

$$\tilde{\Delta u} = (\tilde{A}^T \tilde{Q} \tilde{A} + \tilde{R})^{-1} \tilde{A}^T \tilde{Q} \tilde{E}' \quad (\text{AIX.56})$$

### AIX.3.2 - DMC Multivariável

O desenvolvimento apresentado anteriormente limitou-se ao caso monovariável, onde uma saída controlada requer uma entrada manipulada. Tal situação, porém, não é típica de muitos processos químicos, onde duas ou mais saídas são controladas por duas ou mais entradas. Além disso, todas as entradas influem em todas as saídas, resultando em processos com múltiplas interações.

#### AIX.3.2.1 – Previsão Simples

A representação em modelo de convolução para o caso multivariável é:

$$\begin{aligned}
 \hat{y}_{1,k} &= \sum_{i=1}^N h_{1,1,i} u_{1,k-i} + \sum_{i=1}^N h_{1,2,i} u_{2,k-i} \dots + \sum_{i=1}^N h_{1,m,i} u_{m,k-i} \\
 \hat{y}_{2,k} &= \sum_{i=1}^N h_{2,1,i} u_{1,k-i} + \sum_{i=1}^N h_{2,2,i} u_{2,k-i} \dots + \sum_{i=1}^N h_{2,m,i} u_{m,k-i} \\
 &\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\
 \hat{y}_{c,k} &= \sum_{i=1}^N h_{c,1,i} u_{1,k-i} + \sum_{i=1}^N h_{c,2,i} u_{2,k-i} \dots + \sum_{i=1}^N h_{c,m,i} u_{m,k-i}
 \end{aligned} \tag{AIX.57}$$

Em notação matricial:

$$\underset{\sim}{\hat{y}}_k = \sum_{i=1}^N \underset{\sim}{H}_i \underset{\sim}{u}_{k-i} \tag{AIX.58}$$

Analogamente à equação (AIX.18):

$$\underset{\sim}{\hat{y}}_{k+1} = \underset{\sim}{\hat{y}}_k + \sum_{i=1}^N \underset{\sim}{H}_i \underset{\sim}{\Delta u}_{k+1-i} \tag{AIX.59}$$

O valor corrigido é:

$$\underset{\sim}{y}_{k+1}^c = \underset{\sim}{\hat{y}}_{k+1} + \left( \underset{\sim}{y}_k - \underset{\sim}{\hat{y}}_k \right) \quad (\text{AIX.60})$$

A trajetória desejada é dada por:

$$\underset{\sim}{y}_{k+1}^d = \underset{\sim}{\alpha} \underset{\sim}{y}_k + (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}) \underset{\sim}{r}_k \quad (\text{AIX.61})$$

Impondo:

$$\underset{\sim}{y}_{k+1}^c = \underset{\sim}{y}_{k+1}^d \quad (\text{AIX.62})$$

Chega-se a:

$$\underset{\sim}{\hat{y}}_{k+1} + \underset{\sim}{y}_k - \underset{\sim}{\hat{y}}_k = \underset{\sim}{\alpha} \underset{\sim}{y}_k + (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}) \underset{\sim}{r}_k \quad (\text{AIX.63})$$

$$\underset{\sim}{\hat{y}}_{k+1} - \underset{\sim}{y}_k = (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}) \underset{\sim}{e}_k \quad (\text{AIX.64})$$

onde:

$$\underset{\sim}{e}_k = \underset{\sim}{r}_k - \underset{\sim}{y}_k \quad (\text{AIX.65})$$

Utilizando a equação (AIX.59) em (AIX.64), tem-se:

$$\sum_{i=1}^N \underset{\sim}{H}_i \underset{\sim}{\Delta u}_{k+1-i} = (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}) \underset{\sim}{e}_k \quad (\text{AIX.66})$$

Finalmente:

$$\underset{\sim}{\Delta u}_k = \underset{\sim}{u}_k - \underset{\sim}{u}_{k-1} = \underset{\sim}{H}_1^{-1} \left[ (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}) \underset{\sim}{e}_k - \sum_{i=2}^N \underset{\sim}{H}_i \underset{\sim}{\Delta u}_{k+1-i} \right] \quad (\text{AIX.67})$$

### AIX.3.2.2 - Previsão Múltipla

Para sistemas multivariáveis com previsão de R intervalos futuros, o desenvolvimento é equivalente ao da seção (AIX.3.1.2). A expressão (AIX.27) é no caso multivariável:

$$\hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1} + \sum_{i=1}^N H_i \Delta u_{k+j-i} \quad j = 1, \dots, R \quad (\text{AIX.68})$$

Corrigindo o valor com base no valor atual:

$$y_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j} + (y_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1}) \quad j = 1, \dots, R \quad (\text{AIX.69})$$

onde:

$$y_k^c = y_k$$

Substituindo a equação (AIX.69) na equação (AIX.68), tem-se o modelo corrigido:

$$y_{k+j}^c = y_{k+j-1}^c + \sum_{i=1}^N H_i \Delta u_{k+j-i} \quad j = 1, \dots, R \quad (\text{AIX.70})$$

Repetindo o procedimento apresentado nas equações [(AIX.31)-(AIX.43)], chega-se à forma multivariável da equação (AIX.44):

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+R-1}^c \\ y_{k+R}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ A_2 & A_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ A_{R-1} & A_{R-2} & \cdots & A_1 & 0 \\ A_R & A_{R-1} & \cdots & A_2 & A_1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+R-2} \\ \Delta u_{k+R-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{R-1} \\ y_k + P_R \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.71})$$

onde:

$$\underset{\sim}{P}_i = \sum_{m=1}^i \underset{\sim}{S}_m \quad i=1,...,R \quad (\text{AIX.72})$$

$$\underset{\sim}{S}_m = \sum_{i=m+1}^N \underset{\sim}{H}_i \underset{\sim}{\Delta u}_{k+m-i} \quad m=1,...,R \quad (\text{AIX.73})$$

$$\underset{\sim}{A}_i = \sum_{j=1}^i \underset{\sim}{H}_j \quad i=1,...,R \quad (\text{AIX.74})$$

A trajetória é:

$$\underset{\sim}{y}_{k+j}^d = \underset{\sim}{\alpha}_j \underset{\sim}{y}_k + (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}_j) \underset{\sim}{y}_{sp_k} \quad (\text{AIX.75})$$

Para os R instantes futuros:

$$\begin{bmatrix} \underset{\sim}{y}_{k+1}^d \\ \underset{\sim}{y}_{k+2}^d \\ \vdots \\ \underset{\sim}{y}_{k+R-1}^d \\ \underset{\sim}{y}_{k+R}^d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underset{\sim}{\alpha}_1 & \times & \underset{\sim}{y}_k & + & (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}_1) & \times & \underset{\sim}{y}_{sp_k} \\ \underset{\sim}{\alpha}_2 & \times & \underset{\sim}{y}_k & + & (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}_2) & \times & \underset{\sim}{y}_{sp_k} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \underset{\sim}{\alpha}_{R-1} & \times & \underset{\sim}{y}_k & + & (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}_{R-1}) & \times & \underset{\sim}{y}_{sp_k} \\ \underset{\sim}{\alpha}_R & \times & \underset{\sim}{y}_k & + & (\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\alpha}_R) & \times & \underset{\sim}{y}_{sp_k} \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.76})$$

Subtraindo a equação (AIX.71) da equação (AIX.76), chega-se ao sistema:

$$\underset{\sim}{E} = -\underset{\sim}{A}' \underset{\sim}{\Delta u} + \underset{\sim}{E}' \quad (\text{AIX.77})$$



A definição de  $\tilde{E}$  e  $\tilde{E}'$  é absolutamente análoga à da expressão (AIX.48) e  $\tilde{A}$  e  $\tilde{\Delta}u$  aparecem em (AIX.71). Aplica-se a estratégia DMC de modo equivalente, valendo todas as conclusões apresentadas para sistemas monovariáveis. Para mais detalhes sobre a descrição e bibliografia sobre o algoritmo, consultar as seguintes referências: Desphande (1985), Morshedi et al. (1985), Pinto (1990), Kwong (1992), Odlack (1994), Corrêa (1995), Ehirim (1995), Odlack (1996), Rodrigues (1996a), Rodrigues (1996b), Dechechi (1996), Vasconcelos (1997), Dechechi (1998), Mattedi (1999).

## AIX.4 – GPC

### AIX.4.1 – GPC Monovariável

Admitindo o modelo linearizado em torno de um ponto de operação, pode-se representá-lo pela equação (AIX.12):

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t-1) + \frac{C(q^{-1})\xi(t)\left[1 - (1-\beta)q^{-1}\right]}{\Delta} \quad (\text{AIX.78})$$

O uso do parâmetro  $\beta$  permite, além de um estudo comparativo entre controladores usando modelos “CARMA” e “CARIMA”, a atenuação da ação integral, ao se utilizarem valores de  $\beta$  menores que 1.

Será feito o desenvolvimento matemático do GPC seguindo a metodologia e os conceitos encontrados na literatura, Hodgson (1983), Tuffs (1985), Harris e Billings (1985), Clarke et al. (1987a, 1987b), Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992) e Souza (1993).

Seja a equação Diophantina:

$$C(q^{-1}) = E_j'(q^{-1})A(q^{-1})\Delta + q^{-j}F_j(q^{-1}) \quad (\text{AIX.79})$$

Com o uso do parâmetro  $\beta$ , esta equação deve se reescrita, a fim de incorporar o seu efeito, da seguinte maneira:

$$C(q^{-1})\left[1 - (1-\beta)q^{-1}\right] = E_j(q^{-1})A(q^{-1})\Delta + q^{-j}F_j^*(q^{-1}) \quad (\text{AIX.80})$$

onde:

$$F_j^*(q^{-1}) = F_j(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] \quad (\text{AIX.81})$$

$E_j$  e  $F_j^*$  são polinômios univocamente definidos dados  $A(q^{-1})$ ,  $C(q^{-1})$ ,  $\beta$  e  $j$ , Clarke et al. (1987a, 1987b), obtidos recursivamente, conforme demonstrado no Apêndice X

Multiplicando a equação (AIX.78) por  $E_j(q^{-1}) \Delta q^j$ , tem-se:

$$E_j(q^{-1}) \Delta A(q^{-1}) y(t+j) = E_j(q^{-1}) B(q^{-1}) \Delta u(t+j-1) + \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] C(q^{-1}) E_j(q^{-1}) \xi(t+j) \quad (\text{AIX.82})$$

Substituindo  $E_j(q^{-1}) A(q^{-1}) \Delta$  da equação (AIX.80), tem-se:

$$C(q^{-1}) y(t+j) = F_j^*(q^{-1}) y^*(t) + E_j(q^{-1}) B(q^{-1}) \Delta u^*(t+j-1) + C(q^{-1}) E_j(q^{-1}) \xi(t+j) \quad (\text{AIX.83})$$

onde:

$$y^*(t) = \frac{y(t)}{\left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right]} \quad (\text{AIX.84})$$

$$\Delta u^*(t+j-1) = \frac{\Delta u(t+j-1)}{\left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right]} \quad (\text{AIX.85})$$

Definindo:

$$G_j(q^{-1}) = E_j(q^{-1}) B(q^{-1}) \quad (\text{AIX.86})$$

e substituindo na equação (AIX.83), tem-se:

$$C(q^{-1})y(t+j) = F_j^*(q^{-1})y^*(t) + G_j(q^{-1})\Delta u^*(t+j-1) + C(q^{-1})E_j(q^{-1})\xi(t+j) \quad (\text{AIX.87})$$

Antes de prosseguir com a descrição do algoritmo, serão feitos alguns comentários sobre o polinômio  $C(q^{-1})$ .

Segundo Clarke et al. (1987a, 1987b), muitos processos práticos têm mais de uma perturbação ou ruído atuando sobre eles, resultando no seguinte modelo efetivo da planta:

$$y(t) = \frac{B(q^{-1})}{A(q^{-1})}u(t-1) + \frac{[1 - (1-\beta)q^{-1}]}{A(q^{-1})\Delta} [C_1(q^{-1})\xi_1(t) + \dots + C_n(q^{-1})\xi_n(t)] \quad (\text{AIX.88})$$

Os componentes do ruído podem ser combinados em uma sequência randômica simples:

$$\frac{C(q^{-1})\xi(t)}{A(q^{-1})\Delta}, \text{ onde o polinômio } C(q^{-1}) \text{ tem todas as raízes dentro do círculo unitário.}$$

Chamando  $\sigma_i^2$  a variância de cada ruído individual,  $C(q^{-1})$  só será um polinômio invariante no tempo se os  $\sigma_i^2$  permanecerem constantes. Entretanto, como um processo industrial típico é afetado por perturbações diferentes a tempos diferentes, isto será raramente mantido na prática, que torna uma identificação bem sucedida de  $C(q^{-1})$  improvável na prática.

Se a estrutura de variações não pode ser estimada "on-line", um polinômio de projeto  $T(q^{-1})$ , pode ser usado no lugar de  $C(q^{-1})$ , Clarke et al. (1987a, 1987b).

Uma opção simples é supor  $T(q^{-1}) = 1$ . Outra é utilizar um filtro "passa-baixa"  $1/T(q^{-1})$ , que torna menos ativa a ação de controle para perturbações de alta frequência, evitando sobrecompensação.

Voltando à equação (AIX.87) e fazendo  $C(q^{-1}) = T(q^{-1})$ , tem-se:

$$y(t+j) = F_j^*(q^{-1})y^{*f}(t) + G_j(q^{-1})\Delta u^{*f}(t+j-1) + E_j(q^{-1})\xi(t+j) \quad (\text{AIX.89})$$

onde o sobrescrito <sup>f</sup> indica filtrado por  $1/T(q^{-1})$ .

$$y^{*f}(t) = \frac{y^*(t)}{T(q^{-1})} \quad (\text{AIX.90})$$

$$\Delta u^{*f}(t+j-1) = \frac{\Delta u^*(t+j-1)}{T(q^{-1})} \quad (\text{AIX.91})$$

Vê-se que  $y(t+j)$  consiste de 3 termos, um dependendo de ações de controle futuras, um dependendo de ações de controle passadas, junto com variáveis medidas do processo, e um dependendo de sinais de ruído futuros.

Se  $T(q^{-1}) = C(q^{-1})$ , então as predições são assintoticamente ótimas (variância mínima), pois como o grau de  $E_j(q^{-1})$  é  $(j-1)$ , os componentes do ruído estão todos no futuro, e a equação (AIX.89) toma a seguinte forma:

$$\hat{y}(t+j) = F_j^*(q^{-1}) y^{*f}(t) + G_j(q^{-1}) \Delta u^{*f}(t+j-1) \quad (\text{AIX.92})$$

onde o sobrescrito  $\hat{\phantom{x}}$  indica valor predito.

As restrições e o critério quadrático de custo estão em termos de  $\Delta u(t+j)$ , ao invés de  $\Delta u^{*f}(t+j)$ , e, portanto, a equação da predição deve ser modificada.

Considere a seguinte identidade:

$$G_j(q^{-1}) = G'_j(q^{-1}) T(q^{-1}) \left[ 1 - (1-\beta) q^{-1} \right] + q^{-j} \Gamma_j(q^{-1}) \quad (\text{AIX.93})$$

onde os coeficientes de  $G'_j(q^{-1})$  são os de  $G_j(q^{-1})$  para  $T(q^{-1}) = 1$  e  $\beta = 1$ . Estes coeficientes, juntamente com os de  $\Gamma_j$ , são obtidos recursivamente, como é demonstrado no Apêndice XI.

Combinando a equação (AIX.92) e (AIX.93), chega-se a:

$$\hat{y}(t+j) = F_j^*(q^{-1}) y^{*f}(t) + G'_j(q^{-1}) \Delta u(t+j-1) + \Gamma_j(q^{-1}) \Delta u^{*f}(t-1) \quad (\text{AIX.94})$$

Agrupando os termos da equação (AIX.94) conhecidos no instante  $t$ , tem-se:

$$y^o(t+j) = F_j^*(q^{-1}) y^{*f}(t) + \Gamma_j(q^{-1}) \Delta u^{*f}(t-1) \quad (\text{AIX.95})$$

Portanto, a equação (AIX.94) terá a seguinte forma:

$$\hat{y}(t+j) = y^o(t+j) + G_j'(q^{-1}) \Delta u(t+j-1) \quad (\text{AIX.96})$$

No desenvolvimento de Clarke et al. (1987a, 1987b), empregou-se a idéia do horizonte de controle, Nu, do DMC, tal que o valor do incremento da ação de controle assumido seja igual a zero após Nu:

$$\Delta u(t+j-1) = 0; \quad j > Nu \quad (\text{AIX.97})$$

Reescrevendo a equação (AIX.96) na forma matricial, temos que:

$$\underset{\sim}{\hat{y}} = \underset{\sim}{G'} \underset{\sim}{u} + \underset{\sim}{y^o} \quad (\text{AIX.98})$$

onde:

$$\underset{\sim}{G'} = \left[ \underset{\sim}{g'_{ij}} \right] = \begin{bmatrix} g'_{N1-1} & g'_{N1-2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ g'_{N1} & g'_{N1-1} & g'_{N1-2} & & & & \cdot \\ g'_{N1+1} & g'_{N1} & g'_{N1-1} & \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & \cdot & \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot & \cdot & g'_{N1-2} \\ \cdot & & & & & \cdot & g'_{N1-1} \\ \cdot & & & & & & \cdot \\ g'_{N2-1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & g'_{N2-Nu} \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.102})$$

$(N_2 - N_1 + 1) \times Nu$

$$\underset{\sim}{\hat{y}} = \left[ \hat{y}(t+N_1), \dots, \hat{y}(t+N_2) \right]^T \quad (\text{AIX.99})$$

$$\underline{\bar{u}} = [\Delta u(t), \dots, \Delta u(t + N_u - 1)]^T \quad (\text{AIX.100})$$

$$\underline{y^o} = [y^o(t + N_1), \dots, y^o(t + N_2)]^T \quad (\text{AIX.101})$$

$N_1$  = horizonte mínimo de predição;

$N_2$  = horizonte máximo de predição;

$N_u$  = horizonte de controle.

A matriz  $\underline{G}'$  é de ordem  $(N_2 - N_1 + 1) \times N_u$ , sendo,  $g'_{ij}$ , os coeficientes da resposta ao degrau do processo, igual a zero para  $(j - i \geq N_1)$ .

O comportamento da planta em malha fechada é definido por um trajetória de referência  $w(t+j)$ . A trajetória de referência pode ser obtida recursivamente, utilizando um modelo de primeira ordem, inicializado com a resposta do processo,  $y(t)$ , no tempo considerado, como descrito a seguir:

$$w(t) = y(t) \quad (\text{AIX.103})$$

$$w(t + j) = \alpha w(t + j - 1) + (1 - \alpha) w \quad (\text{AIX.104})$$

$$j = 1, \dots, N_2 - N_1 + 1; \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (\text{AIX.105})$$

$$\underline{w} = [w(t + 1), \dots, w(t + N_2 - N_1 + 1)]^T \quad (\text{AIX.106})$$

onde para  $\alpha = 1$ , tem-se uma transição lenta da variável de saída do processo para o "set point",  $w$ , e para  $\alpha = 0$ , a trajetória de referência corresponde ao próprio "set point".

O objetivo da lei de controle preditivo é dirigir as saídas futuras da planta,  $\hat{y}(t + j)$ , para a trajetória de referência,  $w(t+j)$ . Para isto, minimiza-se o critério de custo quadrático, dado por:

$$J(N_1, N_2, N_u, \lambda) = E \left\{ \begin{bmatrix} \hat{y} - w \\ \underline{\hat{y}} - \underline{w} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \hat{y} - w \\ \underline{\hat{y}} - \underline{w} \end{bmatrix} + \lambda(t) \underline{\bar{u}}^T \underline{\bar{u}} \right\} \quad (\text{AIX.107})$$

onde:

$E$  = representa a esperança matemática;

$\lambda(t)$  = ponderação sobre a ação de controle.

Minimizando  $J$  em relação a  $\bar{u}$ , chega-se a equação (VI.5) do Capítulo VI:

$$\bar{u} = \left( \begin{matrix} G'^T & G' & + \lambda I \end{matrix} \right)^{-1} \begin{matrix} G'^T \\ \approx \end{matrix} \begin{bmatrix} w - y^o \\ \approx \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.108})$$

Somente o primeiro elemento do vetor  $\bar{u}$  é implementado no sistema, determinando a ação de controle corrente:

$$u(t) = u(t-1) + \Delta u(t) \quad (\text{AIX.109})$$

Na equação (AIX.108), o produto  $\begin{matrix} G'^T \\ \approx \end{matrix} \begin{matrix} G' \\ \approx \end{matrix}$  terá como resultado uma matriz de ordem  $(N_u \times N_u)$ . Em particular, se  $N_u = 1$ , esta matriz se reduz a um escalar, que sempre é inversível se pelo menos um coeficiente  $g'_{ij}$  for diferente de zero.

Mais detalhes sobre a descrição do algoritmo consultar: Clarke et al. (1987a, 1987b), Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992) e Souza (1993).

#### AIX.4.2 – GPC Multivariável

A extensão ao caso MIMO basear-se-á na estratégia utilizada por Mothadi et al. (1986), Najim (1988), Souza Júnior (1989) e Ender (1990). Também será considerada a inclusão do parâmetro  $\beta$  no desenvolvimento do algoritmo, o que possibilita ação integral variável.

Para o caso multivariável o modelo interno descrito anteriormente é válido, somente é ampliado para  $n$  entradas e saídas.

Seja o modelo interno:

$$\underset{\sim}{A}(q^{-1})\underset{\sim}{y}(t) = \underset{\sim}{B}(q^{-1})\underset{\sim}{u}(t-1) + \frac{\underset{\sim}{C}(q^{-1})\underset{\sim}{\xi}(t) \left[ 1 - (1-\beta)q^{-1} \right]}{\Delta} \quad (\text{AIX.110})$$

onde  $\underset{\sim}{A}$ ,  $\underset{\sim}{B}$  e  $\underset{\sim}{C}$  são matrizes polinomiais, representadas da seguinte forma:

$$\underset{\sim}{A} = \begin{bmatrix} A_1(q^{-1}) & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & 0 & . \\ 0 & . & . & 0 & A_n(q^{-1}) & . \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.111})$$

$$\underset{\sim}{B} = \begin{bmatrix} B_{1,1}(q^{-1}) & . & . & . & . & B_{1,n}(q^{-1}) \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ B_{n,1}(q^{-1}) & . & . & . & . & B_{n,n}(q^{-1}) \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.112})$$

$$\underset{\sim}{C} = \begin{bmatrix} C_1(q^{-1}) & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & 0 & . \\ 0 & . & . & 0 & C_n(q^{-1}) & . \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.113})$$

$$\underset{\sim}{y}(t) = [y(1,t), y(2,t), \dots, y(n,t)]^T \quad (\text{AIX.114})$$

$$\underset{\sim}{u}(t-1) = [u(1,t-1), u(2,t-1), \dots, u(n,t-1)]^T \quad (\text{AIX.115})$$



$$\tilde{\xi}(t) = [\xi(1,t), \xi(2,t), \dots, \xi(n,t)]^T \quad (\text{AIX.116})$$

$$A_i(q^{-1}) = a_{i,0} + a_{i,1} q^{-1} + \dots + a_{i,n_{a_i}} q^{-n_{a_i}}; \quad (\text{AIX.117})$$

$$B_{i,j}(q^{-1}) = q^{-d_{i,j}} (b_{i,j,0} + b_{i,j,1} q^{-1} + \dots + b_{i,j,n_{b_{i,j}}} q^{-n_{b_{i,j}}}); \quad (\text{AIX.118})$$

$$C_i(q^{-1}) = c_{i,0} + c_{i,1} q^{-1} + \dots + c_{i,n_{c_i}} q^{-n_{c_i}}; \quad (\text{AIX.119})$$

Seja a equação Diophantina:

$$\tilde{C}(q^{-1}) [1 - (1-\beta) q^{-1}] = \underset{\approx}{E_j}(q^{-1}) \underset{\approx}{A}(q^{-1}) \Delta + q^{-j} \underset{\approx}{F_j^*}(q^{-1}) \quad (\text{AIX.120})$$

onde:

$$\underset{\approx}{E_j} = \begin{bmatrix} E_{1,j}(q^{-1}) & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & 0 & . \\ 0 & . & . & 0 & E_{n,j}(q^{-1}) & . \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.121})$$

$$\underset{\approx}{F_j^*} = \begin{bmatrix} F_{1,j}^*(q^{-1}) & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & 0 & . \\ 0 & . & . & 0 & F_{n,j}^*(q^{-1}) & . \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.122})$$

$$F_{i,j}^*(q^{-1}) = F_{i,j}(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta)(q^{-1}) \right] \\ i = 1, \dots, n \quad (\text{AIX.123})$$

$E_j$  e  $F_j^*$  são matrizes polinomiais.

Substituindo (AIX.121) e (AIX.122) em (AIX.120) tem-se que:

$$\begin{aligned} C_1(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] &= E_{1,j}(q^{-1}) A_1(q^{-1}) \Delta + q^{-j} F_{1,j}^*(q^{-1}) \\ \vdots & \\ C_n(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] &= E_{n,j}(q^{-1}) A_n(q^{-1}) \Delta + q^{-j} F_{n,j}^*(q^{-1}) \end{aligned} \quad (\text{AIX.124})$$

Observa-se que a equação (AIX.124) é semelhante ao caso monovariável. Portanto, os coeficientes de  $E_j$  e  $F_j^*$  são obtidos recursivamente conhecendo-se  $A$ ,  $C$ ,  $\beta$  e  $j$ . Mais detalhes consultar o Apêndice X.

Multiplicando a equação (AIX.124) por,  $E_j \Delta q^j$  tem-se:

$$E_j(q^{-1}) \Delta A(q^{-1}) y(t+j) = E_j(q^{-1}) B(q^{-1}) \Delta u(t+j-1) + \\ \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] C(q^{-1}) E_j(q^{-1}) \xi(t+j) \quad (\text{AIX.125})$$

Substituindo  $E_j(q^{-1}) A(q^{-1}) \Delta$  da equação (AIX.120), tem-se:

$$C(q^{-1}) y(t+j) = F_j^*(q^{-1}) y^*(t) + E_j(q^{-1}) B(q^{-1}) \Delta u^*(t+j-1) + \\ C(q^{-1}) E_j(q^{-1}) \xi(t+j) \quad (\text{AIX.126})$$

onde:

$$\tilde{y}^*(t) = \frac{\tilde{y}(t)}{[1 - (1 - \beta)q^{-1}]} \quad (\text{AIX.127})$$

$$\tilde{\Delta u}^*(t+j-1) = \frac{\tilde{\Delta u}(t+j-1)}{[1 - (1 - \beta)q^{-1}]} \quad (\text{AIX.128})$$

Definindo:

$$\tilde{G}_j(q^{-1}) = \tilde{E}_j(q^{-1}) \tilde{B}(q^{-1}) \quad (\text{AIX.129})$$

e substituindo na equação (AIX.126), tem-se:

$$\begin{aligned} \tilde{C}(q^{-1}) \tilde{y}(t+j) = & \tilde{F}_j^*(q^{-1}) \tilde{y}^*(t) + \tilde{G}_j(q^{-1}) \tilde{\Delta u}^*(t+j-1) + \\ & \tilde{C}(q^{-1}) \tilde{E}_j(q^{-1}) \tilde{\xi}(t+j) \end{aligned} \quad (\text{AIX.130})$$

Fazendo  $\tilde{T}(q^{-1}) = \tilde{C}(q^{-1})$  e desprezando todos os termos no futuro, a equação (AIX.130) fica da seguinte forma:

$$\tilde{T}(q^{-1}) \hat{\tilde{y}}(t+j) = \tilde{F}_j^*(q^{-1}) \tilde{y}^*(t) + \tilde{G}_j(q^{-1}) \tilde{\Delta u}^*(t+j-1) \quad (\text{AIX.131})$$

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} \tilde{T}_1(q^{-1}) & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & 0 & . \\ 0 & . & . & 0 & \tilde{T}_n(q^{-1}) & . \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.132})$$

onde o sobrescrito  $\hat{\phantom{x}}$  indica valor predito.

As restrições e o critério quadrático de custo estão em termos de  $\Delta u(t+j)$ , ao invés de  $\Delta u^*(t+j)$ , portanto, a equação da predição deve ser modificada. Para isto considere a seguinte identidade:

$$\underset{\approx}{G}_j(q^{-1}) = \underset{\approx}{G}'_j(q^{-1}) \underset{\approx}{T}(q^{-1}) \left[ 1 - (1-\beta) q^{-1} \right] + q^{-j} \underset{\approx}{\Gamma}_j(q^{-1}) \quad (\text{AIX.133})$$

onde:

$$\underset{\approx}{\Gamma}_j = \begin{bmatrix} \Gamma_{1,1,j}(q^{-1}) & . & . & . & \Gamma_{1,n,j}(q^{-1}) \\ . & . & & & . \\ . & & . & & . \\ . & & & . & . \\ . & & & & . \\ \Gamma_{n,1,j}(q^{-1}) & . & . & . & \Gamma_{n,n,j}(q^{-1}) \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.134})$$

Onde os coeficientes de  $\underset{\approx}{G}'_j(q^{-1})$  são os de  $\underset{\approx}{G}_j(q^{-1})$  para  $\underset{\approx}{T}(q^{-1}) = \underset{\approx}{I}$  e  $\beta = 1$ . Estes coeficientes, juntamente com os de  $\underset{\approx}{\Gamma}_j$ , são obtidos recursivamente, como é apresentado no Apêndice XI.

Combinando a equação (AIX.131) e (AIX.133), chega-se a:

$$\underset{\approx}{T}(q^{-1}) \underset{\approx}{\hat{y}}(t+j) = \underset{\approx}{F}^*_j(q^{-1}) \underset{\approx}{y}^*(t) + \underset{\approx}{G}'_j(q^{-1}) \underset{\approx}{T}(q^{-1}) \underset{\approx}{\Delta u}(t+j-1) + \underset{\approx}{\Gamma}_j(q^{-1}) \underset{\approx}{\Delta u}^*(t-1) \quad (\text{AIX.135})$$

Agrupando os termos da equação (AIX.135) conhecidos no instante  $t$ , tem-se:

$$\underset{\approx}{T}(q^{-1}) \underset{\approx}{y}^o(t+j) = \underset{\approx}{F}^*_j(q^{-1}) \underset{\approx}{y}^*(t) + \underset{\approx}{\Gamma}_j(q^{-1}) \underset{\approx}{\Delta u}^*(t-1) \quad (\text{AIX.136})$$

A equação (AIX.136) pode ser escrita também da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 T_1(q^{-1}) y^o(1, t+j) &= F_{1,j}^*(q^{-1}) y^*(1, t) + \Gamma_{1,1,j}(q^{-1}) \Delta u^*(1, t-1) + \dots + \\
 &\quad \Gamma_{1,n,j}(q^{-1}) \Delta u^*(n, t-1) \\
 \vdots & \\
 T_n(q^{-1}) y^o(n, t+j) &= F_{n,j}^*(q^{-1}) y^*(n, t) + \Gamma_{n,1,j}(q^{-1}) \Delta u^*(1, t-1) + \dots + \\
 &\quad \Gamma_{n,n,j}(q^{-1}) \Delta u^*(n, t-1)
 \end{aligned} \tag{AIX.137}$$

Generalizando:

$$\begin{aligned}
 y^o(i, t+j) &= F_{i,j}^*(q^{-1}) y^{*f_i}(i, t) + \sum_{k=1}^n \Gamma_{i,k,j}(q^{-1}) \Delta u^{*f_i}(k, t-1) \\
 j &= N_1, \dots, N_2; \\
 i &= 1, \dots, n.
 \end{aligned} \tag{AIX.138}$$

onde o sobrescrito  $f_i$  indica filtrado por  $\frac{1}{T_i(q^{-1})}$ .

Utilizando a idéia do horizonte de controle,  $N_u$ :

$$\Delta u(t+j-1) = 0; \quad j > N_u \tag{AIX.139}$$

Reescrevendo a equação (AIX.135) temos que:

$$\hat{y}(t+j) = y^o(t+j) + G_j'(q^{-1}) \Delta u(t+j-1) \tag{AIX.140}$$

ou

$$\hat{y} = G' \bar{u} + y^o \tag{AIX.141}$$

onde:

$$\underset{\sim}{G}' = \underset{\sim}{\left[ \underset{\sim}{g}'_{ij} \right]} = \begin{bmatrix} \underset{\sim}{g}'_{N_1-1} & \underset{\sim}{g}'_{N_1-2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \underset{\sim}{g}'_{N_1} & \underset{\sim}{g}'_{N_1-1} & \underset{\sim}{g}'_{N_1-2} & & & & \cdot \\ \underset{\sim}{g}'_{N_1+1} & \underset{\sim}{g}'_{N_1} & \underset{\sim}{g}'_{N_1-1} & \cdot & & & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot & \cdot & \underset{\sim}{g}'_{N_1-2} \\ \cdot & & & & & \cdot & \underset{\sim}{g}'_{N_1-1} \\ \cdot & & & & & & \cdot \\ \underset{\sim}{g}'_{N_2-1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \underset{\sim}{g}'_{N_2-Nu} \end{bmatrix} \quad (AIX.145)$$

(N<sub>2</sub>-N<sub>1</sub>+1) x Nu

$$\underset{\sim}{\hat{y}} = \left[ \hat{y}(1, t + N_1), \dots, \hat{y}(n, t + N_1), \dots, \hat{y}(1, t + N_2), \dots, \hat{y}(n, t + N_2) \right]^T \quad (AIX.142)$$

$$\underset{\sim}{\bar{u}} = \left[ \Delta u(1, t), \dots, \Delta u(n, t), \dots, \Delta u(1, t + Nu - 1), \dots, \Delta u(n, t + Nu - 1) \right]^T \quad (AIX.143)$$

$$\underset{\sim}{y}^0 = \left[ y^0(1, t + N_1), \dots, y^0(n, t + N_1), \dots, y^0(1, t + N_2), \dots, y^0(n, t + N_2) \right]^T \quad (AIX.144)$$

N<sub>1</sub> = horizonte mínimo de predição;

N<sub>2</sub> = horizonte máximo de predição;

Nu = horizonte de controle.

A matriz  $\underset{\sim}{G}'$  é a matriz que contém os coeficientes da resposta ao degrau das malhas de controle.

O comportamento da planta em malha fechada é definido por um trajetória de referência  $w(t+j)$ . Para sistemas multivariáveis, cada variável controlada possui um trajetória de referência para determinar seu comportamento em malha fechada. Semelhante ao caso SISO, admite-se um

modelo de primeira ordem, inicializado com a resposta do processo,  $y(i,t)$ , no tempo considerado, como descrito a seguir:

$$w(i,t) = y(i,t) \quad (\text{AIX.146})$$

$$w(i,t+j) = \alpha_i w(i,t+j-1) + (1-\alpha_i) w_i \quad (\text{AIX.147})$$

$$j=1,\dots,N_2 - N_1 + 1; \quad i=1,\dots,n \quad 0 \leq \alpha_i \leq 1 \quad (\text{AIX.148})$$

$$\tilde{w} = [w(1,t+1), \dots, w(n,t+1), \dots, w(1,t+N_2 - N_1 + 1), \dots, w(n,t+N_2 - N_1 + 1)]^T \quad (\text{AIX.149})$$

Os mesmos comentários feitos sobre o parâmetro  $\alpha$  anteriormente são válidos aqui também.

Semelhante ao caso SISO, é utilizado um critério de custo quadrático dado por:

$$J(N_1, N_2, N_u, \lambda) = E \left\{ \left[ \begin{array}{c} \hat{y} - \tilde{w} \\ \tilde{u} \end{array} \right]^T \left[ \begin{array}{c} \hat{y} - \tilde{w} \\ \tilde{u} \end{array} \right] + \tilde{u}^T \lambda(t) \tilde{u} \right\} \quad (\text{AIX.150})$$

onde:

$E$  = representa a esperança matemática;

$\lambda(t)$  = matriz diagonal em blocos, que contém as ponderações sobre as ações de controle,  $\lambda_i(t)$ , correspondente a cada malha de controle  $i$ .

Minimizando  $J$  em relação a  $\tilde{u}$ , chega-se a equação (VI.5) do Capítulo VI:

$$\tilde{u} = \left( \begin{array}{cc} G'^T & G' \\ \tilde{u} & \tilde{u} \end{array} + \lambda \begin{array}{c} I \\ \tilde{u} \end{array} \right)^{-1} G'^T \left[ \begin{array}{c} w - y^o \\ \tilde{u} \end{array} \right] \quad (\text{AIX.151})$$

No caso multivariável os primeiros  $n$  elementos do vetor  $\bar{u}$  serão implementados no sistema, determinando as ações de controle correntes:

$$u(i, t) = u(i, t - 1) + \Delta u(i, t) \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{AIX.152})$$

Na equação (AIX.151), o produto  $G'^T G'$  terá como resultado uma matriz de ordem  $(n \text{ Nu} \times n \text{ Nu})$ . Mais detalhes sobre a descrição do algoritmo consultar Mothadi et al. (1986), Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990) e Souza (1993).

Na sequência far-se-á alguns comentários sobre os parâmetros de ajuste envolvidos nos algoritmos preditivos de controle DMC e GPC.

## AIX.5 – Parâmetros Envolvidos nos Controladores DMC e GPC

### AIX.5.1 – Horizonte Mínimo de Predição ( $N_1$ )

Se o tempo morto do processo,  $t_d$ , é exatamente conhecido, o valor de  $N_1$  pode ser fixado como sendo igual à  $t_d$ . Caso  $t_d$  não seja conhecido ou variável,  $N_1$  pode ser fixado igual a 1, sem perda da estabilidade, e o grau de  $B(q^{-1})$  deve ser aumentado para considerar todos os possíveis desconhecidos valores de  $t_d$ , Clarke et al. (1987a, 1987b), Najim (1988), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992), Souza (1993).

Se um processo apresenta resposta inversa, existem algumas alternativas para que o algoritmo de controle ignore esta característica. Uma é escolher um valor de tempo de amostragem maior que a região da resposta inversa, e outra é que  $N_1$  seja escolhido além da resposta inversa.

### AIX.5.2 – Horizonte Máximo de Predição ( $N_2$ )

O valor de  $N_2$  escolhido deve permitir informações suficientes da dinâmica do processo, as quais estão contidas na matriz  $G'$ .

Na prática,  $N_2$  é escolhido próximo ao tempo de ascensão do processo.



Quanto ao esforço computacional, deve-se escolher o menor possível, pois está relacionado com a dimensão da matriz  $G'_{\approx}$ . Para sistemas com resposta inversa, o valor de  $N_2$  deve ser escolhido com mais critério.

O aumento de  $N_2$  provoca ações de controle mais amenas; e uma diminuição, ações de controle mais enérgicas, Clarke et al. (1987a, 1987b), Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992), Souza (1993).

### AIX.5.3 – Horizonte de Controle ( $N_u$ )

O horizonte de controle foi uma idéia retirada do algoritmo de controle DMC e incorporado no GPC, sendo um importante parâmetro de projeto, que influi na dimensão da matriz  $G'_{\approx}$  e, portanto, no esforço computacional do algoritmo. É interessante assumir o menor valor possível para este parâmetro.

O aumento do valor de  $N_u$  provoca ações de controle mais enérgicas, até um certo ponto, onde qualquer aumento em  $N_u$  ocasionará pouca diferença. Geralmente o valor de  $N_u$  igual a 1 dá aceitável controle. Um aumento em  $N_u$  é apropriado para sistemas complexos.

Pequenos valores de  $N_u$  podem garantir a inversão da matriz  $G'^T G'_{\approx}$  para sistemas com tempo morto elevado, mesmo para  $\lambda = 0$ .

Com o uso da restrição do horizonte para as ações de controle, consegue-se uma amenização das mesmas, e também uma estabilidade da malha fechada, pois a solução da equação (AIX.108) ou (AIX.151) torna-se um sistema sub-determinado, para cuja solução se faz necessário o uso de técnicas de otimização, Clarke et al. (1987a, 1987b), Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992), Souza (1993).

### AIX.5.4 – Fator de Supressão de Movimento ( $\lambda$ )

Os algoritmos preditivos são providos de um peso, restrição, sobre a ação de controle, que é exercido pelo parâmetro  $\lambda$ .

Quanto maior seu valor, menos enérgica será a ação de controle, dando estabilidade e diminuindo as oscilações da malha fechada.

Para sistemas com tempo morto elevado, a inversão da matriz  $G'^T G'_{\approx}$  pode não ser garantida. Para isso muitas vezes é necessário utilizar  $\lambda > 0$ , para garantir a inversão, Ender (1990).

Mais detalhes consultar Clarke et al. (1987a, 1987b), Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992), Souza (1993).

#### AIX.5.5 – Constante da Trajetória de Referência ( $\alpha$ )

Este parâmetro, como o próprio nome diz, está relacionado com o comportamento imposto pela trajetória de referência.

Para pequenos valores de  $\alpha$ , tem-se uma trajetória de referência menos suave, o que pode levar à sobre-elevações e ações de controle mais enérgicas. Já para um aumento de  $\alpha$ , tem-se uma trajetória suave, permitindo menor oscilações na variável controlada.

No caso de  $\alpha = 0$ , tem-se a trajetória igual ao “set point”, sendo este o caso em que se tem maior velocidade por parte do algoritmo em função do parâmetro, Clarke et al. (1987a, 1987b), Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992), Souza (1993).

#### AIX.5.6 – Constante de Ação Integral ( $\beta$ )

Este parâmetro permite variar a ação integral do controlador, podendo levar o modelo a forma “CARMA”,  $\beta = 0$ , sem ação integral, ou “CARIMA”,  $\beta = 1$ , com ação integral.

Como o algoritmo GPC é sensível a perturbações estocásticas, pode-se reduzir esta sensibilidade, quando as perturbações forem relevantes, adotando valores para  $\beta < 1$ , Souza Júnior (1989), Ender (1990), Toledo (1992).

### AIX.6 – Mínimos Quadrados Recursivos com Fator de Esquecimento Variável Escalar

#### AIX.6.1 – Monovariável

A estimação dos parâmetros foi realizada pela técnica de identificação “on-line” dos mínimos quadrados recursivos ou “RLS” (“recursive least squares”), Isermann (1981), Aström e Wittenmark (1984).

Definindo o vetor de parâmetros,  $\theta$ :

$$\theta(t-1) = [a_1, a_2, \dots, a_{na}, b_0, b_1, \dots, b_{nb}]^T \quad (\text{AIX.153})$$

e o vetor de dados:

$$\mathbf{x}^T(t) = [-y(t-1), -y(t-2), \dots, -y(t-na), u(t-1), u(t-2), \dots, u(t-nb-1)] \quad (\text{AIX.154})$$

a técnica “RLS”, Souza Júnior (1988), Isermann (1989), encontra estimativas,  $\hat{\theta}$ , dos parâmetros desconhecidos,  $\theta$ , de modo a minimizar a função:

$$J(\hat{\theta}) = \sum_{j=1}^t \varphi(t)^{t-j} [y(j) - \hat{\phi}(j)]^2 \quad (\text{AIX.155})$$

com  $0 < \varphi(t) \leq 1$

onde  $\hat{\phi}$  é o valor da saída do modelo predita pelas estimativas  $\hat{\theta}$ .

Logo para o tempo t:

$$\hat{\phi}(t) = \mathbf{x}^T(t) \hat{\theta}(t-1) \quad (\text{AIX.156})$$

sendo que  $\varphi(t)$  é um parâmetro conhecido por fator de esquecimento, que permite que dados mais recentes influenciem mais do que os dados antigos, para valores de  $\varphi(t) < 1$ .

O algoritmo de estimação utilizado é dado por:

$$\varepsilon(t) = y(t) - \mathbf{x}^T(t) \hat{\theta}(t-1) \quad (\text{AIX.157})$$

$$\mathbf{S}(t) = \mathbf{x}^T(t) \mathbf{P}(t-1) \mathbf{x}(t) \quad (\text{AIX.158})$$

$$\mathbf{H}(t) = \frac{1}{V_0} [1 - \mathbf{S}(t) - \varepsilon^2(t)] \quad (\text{AIX.159})$$

$$\varphi(t) = \frac{1}{2} \left[ H(t) + (H^2(t) + 4S(t))^{1/2} \right] \quad (\text{AIX.160})$$

$$\tilde{K}(t) = \tilde{P}(t-1) \tilde{x}(t) \left[ S(t) + \varphi(t) \right]^{-1} \quad (\text{AIX.161})$$

$$\tilde{\hat{\theta}}(t) = \tilde{\hat{\theta}}(t-1) + \tilde{K}(t) \varepsilon(t) \quad (\text{AIX.162})$$

$$\tilde{P}(t) = \frac{1}{\varphi(t)} \left[ \left( \tilde{I} - \tilde{K}(t) \tilde{x}^T(t) \right) \tilde{P}(t-1) \right] \quad (\text{AIX.163})$$

O parâmetro  $V_0$  está relacionado com a velocidade de adaptação do estimador, sendo que para valores pequenos de  $V_0$ , tem-se um estimador sensível, com rápida adaptação, um valor maior, um estimador menos sensível, com uma adaptação mais lenta, o qual por sua vez é escolhido pelo usuário.

Muitos controladores adaptativos, “self-tuning”, na literatura começam com a suposição de que o modelo da planta debaixo de controle discreto no tempo e sujeito a perturbações é descrito pelo modelo localmente linearizado, dado pela equação (AIX.6):

$$A(q^{-1}) y(t) = B(q^{-1}) u(t-1) + x(t) \quad (\text{AIX.164})$$

Quando os parâmetros, e em conseqüência  $\hat{\phi}(t)$ , tem polaridade ou “bias”, o controlador é incapaz de produzir erro nulo no estado estacionário. Isto acontece porque a fonte de “off set” não foi modelada na equação acima e não é surpreendente que o resultado da lei de controle seja sensível a ruídos do processo com média diferente de zero, Souza Júnior (1989).

Uma suposição adicional que até certo ponto supera o problema de “off set” é modelar a equação acima como:

$$A(q^{-1}) y(t) = B(q^{-1}) u(t-1) + x(t) + d \quad (\text{AIX.165})$$

onde  $d$  é o vetor de constantes correspondentes à resposta do estado estacionário para um vetor  $u$  nulo.

A estimativa da constante  $d$ , por ser um parâmetro atípico, pode até, por sua vez, comprometer o desempenho do controlador.

Alguns autores sugerem que  $d$  pode ser estimado pelo "RLS", aumentando  $\tilde{x}^T$  para  $[-y(t-1), \dots, u(t-1), \dots, 1]$ , mas também há necessidade de certos artifícios, exceto aumentar a dimensão de  $\tilde{x}^T$ . Um deles, cuja simplicidade de implementação e eficiência constatada, é o de manter constante o elemento da diagonal da matriz de covariância correspondente ao parâmetro  $d$ , Rubião (1990).

Uma outra maneira de se contornar as dificuldades geradas pela necessidade de se estimar a constante  $d$  é a simples eliminação deste problema pelo uso de um modelo incremental ao invés do modelo posicional, dado pela equação (AIX.165).

Assim, ao invés de desvios do estado estacionário, valores medidos de entrada e saída do processo passam a ser empregados da seguinte forma:

$$y'(t) = \frac{y(t)(1 - q^{-1})}{(1 - (1 - \beta)q^{-1})} \quad (\text{AIX.166})$$

$$u'(t) = \frac{u(t)(1 - q^{-1})}{(1 - (1 - \beta)q^{-1})} \quad (\text{AIX.167})$$

Reescrevendo a equação (AIX.165), tem-se:

$$A(q^{-1})y'(t) = B(q^{-1})u'(t-1) + x(t) \quad (\text{AIX.168})$$

no caso de  $x(t) = C(q^{-1})\xi(t)$ , tem-se:

$$A(q^{-1})y'(t) = B(q^{-1})u'(t-1) + C(q^{-1})\xi(t) \quad (\text{AIX.169})$$

ou ainda utilizando  $T(q^{-1}) = C(q^{-1})$ :

$$A(q^{-1})y'^f(t) = B(q^{-1})u'^f(t-1) + \xi(t) \quad (\text{AIX.170})$$

Isto significa que os sinais utilizados no estimador são filtrados por  $T(q^{-1})$ .

As condições de inicialização do estimador foram:

$$\underset{\sim}{P}(0) = 10^6 \underset{\sim}{I} \quad (\text{AIX.171})$$

$$\underset{\sim}{\hat{\theta}}(0) = [0, 0, \dots, 0]^T \quad (\text{AIX.172})$$

$$\underset{\sim}{x}^T(0) = [0, 0, \dots, 0] \quad (\text{AIX.173})$$

### AIX.6.2 – Multivariável

A alteração necessária em relação ao “RLS” monovariável, é a definição do vetor de parâmetros, que ficará da seguinte forma:

$$\underset{\sim}{\theta}_i(t-1) = \begin{bmatrix} a_{i,1}, a_{i,2}, \dots, a_{i,n_{a_i}}, b_{i,j,0}, b_{i,j,1}, \dots, b_{i,j,n_{b_j}}, \dots \\ \dots, b_{i,n,0}, b_{i,n,1}, \dots, b_{i,n,n_{b_n}} \end{bmatrix}^T \quad (\text{AIX.174})$$

e o vetor de dados:

$$\underset{\sim}{x}_i^T(t) = \begin{bmatrix} -y(i,t-1), \dots, -y(i,t-n_{a_i}), u(j,t-1), u(j,t-2), \dots, u(j,t-n_{b_j}), \\ \dots, u(n,t-1), u(n,t-2), \dots, u(n,t-n_{b_n}) \end{bmatrix} \quad (\text{AIX.175})$$

onde :

$$i = 1, \dots, n;$$

$$j = 1, \dots, n.$$

Para evitar o conhecimento do estado estacionário, foi utilizado um modelo incremental, da seguinte forma:

$$y'(i,t) = \frac{y(i,t)(1-q^{-1})}{(1-(1-\beta)q^{-1})} \quad (\text{AIX.176})$$

$$u'(i,t) = \frac{u(i,t)(1-q^{-1})}{(1-(1-\beta)q^{-1})} \quad (\text{AIX.177})$$

ou:

$$\begin{aligned} A_1(q^{-1})y'(1,t) &= B_{1,1}(q^{-1})u'(1,t-1) + \dots + B_{1,n}(q^{-1})u'(n,t-1) + \\ &\quad C_1(q^{-1})\xi(1,t) \\ \vdots & \\ A_n(q^{-1})y'(n,t) &= B_{n,1}(q^{-1})u'(1,t-1) + \dots + B_{n,n}(q^{-1})u'(n,t-1) + \\ &\quad C_n(q^{-1})\xi(n,t) \end{aligned} \quad (\text{AIX.178})$$

Utilizando o polinômio  $T(q^{-1})$  no lugar de  $C(q^{-1})$ , a equação (AIX.178) fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} A_1(q^{-1})y'^{f_1}(1,t) &= B_{1,1}(q^{-1})u'^{f_1}(1,t-1) + \dots + B_{1,n}(q^{-1})u'^{f_1}(n,t-1) + \\ &\quad \xi(1,t) \\ \vdots & \\ A_n(q^{-1})y'^{f_n}(n,t) &= B_{n,1}(q^{-1})u'^{f_n}(1,t-1) + \dots + B_{n,n}(q^{-1})u'^{f_n}(n,t-1) + \\ &\quad \xi(n,t) \end{aligned} \quad (\text{AIX.179})$$

onde o sobrescrito  $f_i$  significa que os valores utilizados no estimador são filtrados por  $1/T_i(q^{-1})$ .

A inicialização e os comentários feitos anteriormente são os mesmos para o caso multivariável.

Um estudo bastante amplo sobre diferentes métodos de estimação de parâmetros foi realizado por Souza Júnior (1989), do qual conclui-se que a técnica de identificação “on-line” dos mínimos quadrados recursivos, “RLS”, com fator de esquecimento variável escalar, garante um bom acompanhamento do processo, sem problemas para a matriz de covariância.

Quando o método descrito anteriormente apresentar problemas com a matriz de covariância, utilizar a técnica de identificação com fatorização UD

para a mesma, para tal consultar Bierman (1977), Secchi(1988), Souza Júnior (1989) e Rubião (1990).

Mais detalhes consultar Clarke et al. (1987a, 1987b), Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992), Souza (1993), Seborg et al. (1986).

## AIX.7 - STGPC

O controle auto-ajustável é uma opção bastante interessante quando se trata com processos não-lineares ou variantes no tempo, como no caso de processos químicos.

Os parâmetros do modelo interno, que se permitem representar a dinâmica do processo, podem não satisfazer as exigências necessárias para um controle eficaz durante um período longo de operação, como o caso do controle não auto-ajustável.

A extensão à forma auto-ajustável tem por objetivo contornar estes problemas apresentados pelos processos químicos, garantindo uma boa representação dinâmica através do seu modelo interno, e, conseqüentemente, um controle efetivo. Portanto, a estratégia de um controlador auto-ajustável é definida da seguinte maneira:

1. admite-se um modelo do processo a ser controlado, modelo interno, como no caso não auto-ajustável, sendo que este contém os parâmetros que serão atualizados a cada instante de amostragem;
2. faz-se uso de um estimador de parâmetros, para determinar a cada intervalo de amostragem o conjunto de parâmetros que melhor representam o processo no instante desejado;
3. fazendo-se uso destes parâmetros e de um algoritmo de projeto, calculam-se os parâmetros do controlador;
4. com os parâmetros do controlador atualizados, realiza-se o cálculo da nova ação de controle a ser implementada no processo;
5. estas etapas são repetidas a cada instante de amostragem.

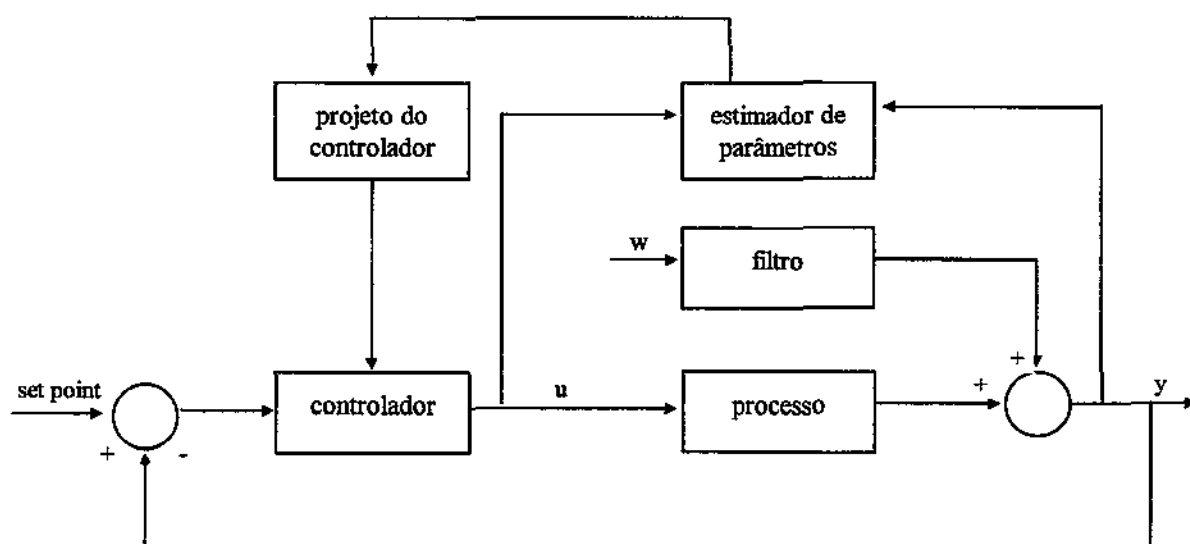
Procura-se optar por um controlador de fácil projeto, pois a atualização dos seus parâmetros é feita a cada intervalo de amostragem, sendo o tempo gasto nesta tarefa de grande importância para o controle.

Escolheu-se por isso o GPC para ser implementado na forma auto-ajustável, STGPC, devido ao seu modelo interno ser representado na forma paramétrica, a qual é muito mais prática e fácil de ser estimada frente às



representações não paramétricas, além do fato da superioridade do GPC em relação ao DMC no controle do reator catalítico de leito fixo.

Neste caso é válida toda a estratégia utilizada na forma não auto-ajustável. No entanto, a cada tempo de amostragem, os parâmetros do modelo interno assumido são estimados recursivamente através de dados de entrada e saída do processo, fornecidos ao algoritmo de estimação, conforme a Figura AIX.5 a seguir.



**Figura AIX.5 - Diagrama de Blocos de um Controlador Adaptativo**

Portanto, no controle auto-ajustável a matriz  $G' \approx$  do algoritmo GPC, será calculada a cada instante de amostragem. O GPC foi estendido à forma adaptativa, STGPC, através do acoplamento da técnica de identificação “on-line” dos mínimos quadrados recursivos, “RLS”, com fator de esquecimento variável escalar, Najim (1988), Souza Júnior (1989), Rubião(1990), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992) e Souza (1993).

## APÊNDICE X

### Cômputo Recursivo dos Parâmetros da Equação Diophantina

Seja a equação (AIX.80):

$$C(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] = E_j(q^{-1}) A(q^{-1}) \Delta + q^{-j} F_j^*(q^{-1}) \quad (\text{AX.1})$$

Simplificando a notação, adotam-se as seguintes variáveis:

$$E = E_j(q^{-1});$$

$$R = E_{j+1}(q^{-1});$$

$$F = F_j^*(q^{-1});$$

$$S = F_{j+1}^*(q^{-1});$$

$$\tilde{A} = A(q^{-1}) \Delta;$$

Sejam as equações diophantinas:

$$C(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] = E \tilde{A} + q^{-j} F \quad (\text{AX.2})$$

$$C(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] = R \tilde{A} + q^{-(j+1)} S \quad (\text{AX.3})$$

Subtraindo a equação (AX.2) da equação (AX.3), obtem-se:

$$0 = \tilde{A} (R - E) + q^{-j} (q^{-1} S - F) \quad (\text{AX.4})$$

Como o polinômio  $(R - E)$  é de grau  $j$ , pode-se escrever:

$$R - E = \tilde{R} + q^{-j} r_j \quad (\text{AX.5})$$

Substituindo a equação (AX.5) na equação (AX.4):

$$0 = \tilde{A} \tilde{R} + q^{-j} (\tilde{A} r_j + q^{-1} S - F) \quad (\text{AX.6})$$

Da equação (AX.6) conclui-se que:

$$\tilde{R} = 0 \quad (\text{AX.7})$$

$$S = q (F - \tilde{A} r_j) \quad (\text{AX.8})$$

Como  $\tilde{a}_0 = 1$ , tem-se:

$$r_j = f_0 \quad (\text{AX.9})$$

$$s_i = f_{i+1} - \tilde{a}_{i+1} r_j \quad (\text{AX.10})$$

para  $i = 0$  até o grau de  $S$ .

Reescrevendo a equação (AX.5):

$$R = E + q^{-j} r_j \quad (\text{AX.11})$$

Os coeficientes de  $E_{j+1}(q^{-1})$  e  $F_{j+1}^*(q^{-1})$  são obtidos, respectivamente de (AX.9) a (AX.11), supondo-se conhecidos  $E_j(q^{-1})$ ,  $F_j^*(q^{-1})$  e  $A(q^{-1})$ .

O cômputo recursivo necessita de uma inicialização, para  $j = 1$ , logo:

$$C(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] = E_1(q^{-1}) A(q^{-1}) \Delta + q^{-1} F_1(q^{-1}) \quad (\text{AX.12})$$

e como  $\tilde{a}_0 = 1$ , temos que:

$$E_1 = 1 \quad (\text{AX.13})$$

$$F_1 = q \left[ C(q^{-1}) \left[ 1 - (1 - \beta) q^{-1} \right] - \tilde{A} \right] \quad (\text{AX.14})$$

Procedimento semelhante é aplicado para o caso multivariável.

Mais detalhes consultar Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992) e Souza (1993).

## APÊNDICE XI

### Determinação dos Coeficientes de $G'_j$ e $\Gamma_j$

Inicialmente é feito o desenvolvimento para o caso SISO, em seguida são indicadas as alterações necessárias para o caso MIMO.

Considere as identidades Diophantinas:

$$G_j(q^{-1}) = G'_j(q^{-1}) T(q^{-1}) + q^{-j} \Gamma_j(q^{-1}) \quad (\text{AXI.1})$$

$$G_{j+1}(q^{-1}) = G'_{j+1}(q^{-1}) T(q^{-1}) + q^{-(j+1)} \Gamma_{j+1}(q^{-1}) \quad (\text{AXI.2})$$

note que,

$$G_j(q^{-1}) = E_j(q^{-1}) B(q^{-1}) \quad (\text{AXI.3})$$

onde:

$$E_j(q^{-1}) = e_0 + e_1 q^{-1} + \dots + e_{j-1} q^{-(j-1)} \quad (\text{AXI.4})$$

Subtraindo a equação (AIX.1) da equação (AIX.2), tem-se que:

$$q^{-j} e_j B(q^{-1}) = q^{-j} g'_j T(q^{-1}) + q^{-j} \left[ q^{-1} \Gamma_{j+1} - \Gamma_j \right] \quad (\text{AXI.5})$$

da equação (AXI.5), pode-se dizer que por comparação de grau:

$$g'_j = \frac{1}{t_0} \left[ e_j b_0 + \gamma_{(j),0} \right] \quad (\text{AXI.6})$$

Fazendo  $i = 0$  até o max (nb, nt) em (AXI.5), tem-se:

$$e_j B(q^{-1}) = g'_j T(q^{-1}) + q^{-1} \Gamma_{j+1} - \Gamma_j \quad (\text{AXI.7})$$

onde:

$$\Gamma_j = \gamma_{(j),0} + \gamma_{(j),1} q^{-1} + \dots + \gamma_{(j),i} q^{-i} \quad (\text{AXI.8})$$

$$\Gamma_{j+1} = \gamma_{(j+1),0} + \gamma_{(j+1),1} q^{-1} + \dots + \gamma_{(j+1),i} q^{-i} \quad (\text{AXI.9})$$

Substituindo (AXI.8) e (AXI.9) em (AXI.7):

$$\gamma_{(j+1),i} = e_j b_{i+1} + \gamma_{(j),i+1} - g'_j t_{i+1} \quad (\text{AXI.10})$$

Obviamente, o cômputo recursivo descrito acima necessita de uma inicialização, a qual é da seguinte forma:

$$g'_0 = b_0 \quad (\text{AXI.11})$$

$$\gamma_{(1),i} = b_{i+1} - b_0 t_{i+1} \quad (\text{AXI.12})$$

A extensão ao caso multivariável exige poucas alterações, conforme pode ser observado a seguir.

Para cada função de transferência da matriz função de transferência,  $G_p(q^{-1})$ , deverão ser determinados os parâmetros  $g'_j$  e  $\gamma_{(j),i}$  de forma análoga ao caso monovariável. Portanto, as equações (AXI.6) e (AXI.10), ficam da seguinte forma:

$$g'_{m,k,j} = \frac{1}{t_{m,0}} \left[ e_{m,j} b_{m,k,0} + \gamma_{m,k,(j),0} \right] \quad (\text{AXI.13})$$

$$\gamma_{m,k,(j),i} = e_{m,j} b_{m,k,i+1} + \gamma_{m,k,(j),i+1} - g'_{m,k,j} t_{m,i+1} \quad (\text{AXI.14})$$

$$\Gamma_j \approx \begin{bmatrix} \Gamma_{1,1,j}(q^{-1}) & . & . & . & . & \Gamma_{1,k,j}(q^{-1}) \\ . & . & & & & . \\ . & & . & & & . \\ . & & & . & & . \\ . & & & & . & . \\ \Gamma_{m,1,j}(q^{-1}) & . & . & . & . & \Gamma_{m,k,j}(q^{-1}) \end{bmatrix} \quad (\text{AXI.15})$$

$m = 1, \dots, n;$

$k = 1, \dots, n;$

$j = 1, \dots, N_2.$

onde  $n$  é o número de malhas de controle do sistema multivariável.

A inicialização para o caso multivariável também fica numa forma análoga ao monovariável.

$$\mathbf{g}'_{m,k,0} = \mathbf{b}_{m,k,0} \quad (\text{AXI.16})$$

$$\gamma_{m,k,(1),i} = \mathbf{b}_{m,k,i+1} - \mathbf{b}_{m,k,0} \mathbf{t}_{m,i+1} \quad (\text{AXI.17})$$

Mais detalhes consultar Najim (1988), Souza Júnior (1989), Ender (1990), Bolzan (1991), Toledo (1992) e Souza (1993).